



**HAL**  
open science

# Etudes expérimentale et numérique de l'effet des mécanismes de plasticité sur la rupture fragile par clivage dans les aciers faiblement alliés

Maximilien Libert

► **To cite this version:**

Maximilien Libert. Etudes expérimentale et numérique de l'effet des mécanismes de plasticité sur la rupture fragile par clivage dans les aciers faiblement alliés. Sciences de l'ingénieur [physics]. Ecole Centrale Paris, 2007. Français. NNT: . tel-00413677

**HAL Id: tel-00413677**

**<https://theses.hal.science/tel-00413677>**

Submitted on 4 Sep 2009

**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.

**ÉCOLE CENTRALE DES ARTS  
ET MANUFACTURES  
« ÉCOLE CENTRALE PARIS »**

**THÈSE**

Présentée par

**Maximilien LIBERT**

pour l'obtention du

**GRADE DE DOCTEUR**

**Spécialité : Mécanique & Matériaux**

**Laboratoire d'accueil : MSSMat**

**SUJET :**

**Etudes expérimentale et numérique de l'effet des mécanismes de  
plasticité sur la rupture fragile par clivage dans les aciers  
faiblement alliés**

**Thèse soutenue publiquement le 21 Septembre 2007**

**devant un jury composé de :**

**Mr Jacques BESSON (ENSMP)  
Mme Suzanne DEGALLAIX (EC-Lille)  
Mr Philippe BOMPARD (ECP)  
Mr Stéphane BUGAT (EDF)  
Mr Bernard MARINI (CEA)  
Mme Colette REY (ECP)**

**Rapporteur  
Rapporteur  
Président  
Examineur  
Examineur  
Directeur de thèse**



## Remerciements

### *Aux membres du jury :*

Je tiens tout d'abord à remercier Mr Philippe BOMPARD d'avoir accepté de présider le jury de thèse, et ce malgré un emploi du temps chargé. Je suis également très touché du grand intérêt qu'il a manifesté à l'égard de mes travaux. J'exprime également toute ma reconnaissance envers Mme Suzanne DEGALLAIX et Mr Jacques BESSON pour avoir accepté de rapporter sur mon manuscrit de thèse : leur relecture minutieuse ainsi que leurs questions et remarques très pertinentes ont permis d'apporter des réponses à quelques problèmes en suspens et de poser de nombreuses questions ouvertes. En somme, leur travail a contribué à enrichir les travaux présentés dans le manuscrit. Je remercie également Mr Stéphane BUGAT pour la pertinence, l'originalité et la diversité de ses questions et remarques.

### *Au CEA Saclay :*

Je tiens d'abord à remercier Mr Bernard MARINI pour son regard critique, ses remarques pertinentes et les nombreuses discussions qui ont animé les réunions d'avancement. Je remercie également Ludovic VINCENT pour tous les services rendus, notamment lors du choix et de l'implémentation du modèle de comportement. J'en profite également pour saluer toutes les personnes qui m'ont aidé à mener à bien les caractérisations microstructurales et essais mécaniques au service SRMA : Françoise BARCELO, Jean Luc BECHADE, Christelle CAES, Grégory PEREZ, Pierre WIDENT. Je salue au passage toutes celles et ceux que j'ai croisés durant ces quatre années au CEA Saclay.

### *Aux membres du laboratoire*

Je tiens en premier lieu à exprimer ma reconnaissance envers Mme Colette REY pour m'avoir accueilli dans le laboratoire MSSMat en stage de DEA puis en thèse. Je la remercie chaleureusement pour son encadrement de tous les instants ainsi que pour le soutien dont elle a fait preuve durant l'ensemble de la thèse. Je la remercie également pour la grande liberté dont j'ai pu bénéficier pour mener à bien mes travaux.

Je suis sincèrement reconnaissant envers Clotilde BERDIN de m'avoir très largement aidé à apprendre l'utilisation du code de calcul ABAQUS. Je lui serai toujours reconnaissant pour la patience, les conseils avisés et les encouragements dont elle a fait preuve. Je remercie également Michel CLAVEL et Claude PRIOUL d'avoir bien voulu collaborer à ces travaux, et d'avoir contribué à appréhender les différents aspects de mon sujet de thèse.

Je tiens à remercier Paul AGHI, Sylviane BOURGEOIS, Françoise GARNIER et Sokona KONATE de leur aide précieuse pour les préparations d'échantillons, les observations microstructurales et les essais mécaniques.

J'ai également une pensée envers tous ceux et toutes celles qui m'ont rendu des services précieux et avec qui j'ai passé de bons moments de discussion ou de détente autour d'un café : Thierry HOC, Daniel KERVERN, Fleur LITOUST, Denis MARTIN, Isabelle MASSIP, Nadège OLS, Eric PERRIN, Guillaume PUEL et Nicolas ROUBIER.

### *Aux thésards (ou ex-thésards !) du laboratoire*

Outre l'aspect scientifique, ces quatre années de thèse me laisseront un souvenir très fort pour tous les moments passés au laboratoire en si bonne compagnie. Je ne sais pas si j'aurais pu mener à bien ce long travail sans votre soutien, votre solidarité et votre bonne humeur communicative.

Tout d'abord, merci aux 'vétérans' Arsène, Benoît, Jérôme, Mejido, Olivier, Seddik et Serge pour vos conseils éclairés, mais également pour l'accueil chaleureux que vous avez réservé au 'nouveau' thésard que j'étais il y a quatre ans !

Merci à Amjad, Cédric, Christine, David et Laurent, les compagnons de fortune qui avez partagé avec moi les hauts et les bas de ma vie de doctorant durant ces 4 années : inévitablement, je repense aux calculs qui plantent inexplicablement, aux périodes de doute et de remise en question, voire aux repas au RU de l'ECP ; mais je garde surtout en mémoire les repas de Noël au MSSMat, les 'flims qui ne sont pas des flims sur le cyclimse' et les séjours mémorables à Etretat et à Aussois, sans oublier les séances d'escalade en salle ou à la montagne !

Et enfin, merci aux 'petits nouveaux' qui sont arrivés au laboratoire pendant ces 4 années : Anne (les deux !), Cécile, Denis, Jeanne et Julien. Je vous remercie pour votre bonne humeur, et votre soutien de chaque instant et je me remémore tous les moments de rire et de détente que ce soit dans mon bureau, au thé ou au café ou devant un mythique Lorient-PSG (n'est ce pas Denis) ! J'en profite pour vous souhaiter bon courage et à n'en pas douter beaucoup de réussite dans l'aboutissement de vos travaux de thèse !

### *A ma famille*

Je vous dédie ce mémoire pour toute l'attention, la confiance, le dévouement et les encouragements dont vous avez su faire preuve durant l'ensemble de mon parcours. Un grand merci à mes parents, à 'mamie', à Aurélien et toute la famille, vous qui avez si grandement contribué à maintenir mon moral au beau fixe dans les moments critiques et vous qui m'avez grandement aidé à résoudre bien des tracas de la vie quotidienne. Ce manuscrit n'aurait sans doute jamais vu le jour sans vous !

## Résumé

Il est crucial de garantir l'intégrité des cuves de réacteurs à eau pressurisée (REP) en cas de fonctionnement accidentel : dans ce contexte, la compréhension et la modélisation des mécanismes de rupture fragile des aciers constituent des éléments décisifs de l'évaluation complexe des durées de vie des cuves.

Les modèles d'approche locale de la rupture par clivage constituent l'un des principaux outils de prédiction de la ténacité des aciers faiblement alliés. La dispersion des contraintes à rupture est interprétée comme un effet de la distribution des défauts dans la microstructure, mais l'effet des hétérogénéités mécaniques n'est pas pris en compte. Or, en dessous d'une température de transition de comportement  $T_a$  (de l'ordre de 25°C), les mécanismes de déformation sont grandement affectés par la température et la vitesse de déformation.

Notre approche consiste à prendre en compte l'effet des hétérogénéités de contraintes dans un critère local d'amorçage du clivage. Les résultats de calculs de microstructure sont utilisés pour proposer une description statistique de l'évolution des distributions de contraintes locales. Cette approche statistique permet de proposer un modèle d'approche locale de la rupture dépendant à la fois des hétérogénéités mécaniques et des distributions de tailles de défauts.

Le comportement du matériau et son évolution sont caractérisés aux échelles microscopique et macroscopique dans le domaine de température [25°C,-196°C]. Des essais de traction simple, de sauts de vitesse et de température, et de ténacité sont réalisés.

Nous proposons un modèle de comportement micromécanique décrivant le comportement plastique en dessous de la température de transition  $T_a$ . La loi de comportement est basée sur les mécanismes de déformation décrits dans la bibliographie et identifiée par méthode inverse à partir des essais mécaniques. Les observations au MET et la caractérisation du comportement activé thermiquement permettent de fixer plusieurs paramètres du modèle.

Des simulations sont réalisées afin de modéliser les distributions de contrainte principale  $\sigma_I$  dans deux microstructures bainitiques correspondant au volume élémentaire de l'approche locale de la rupture. L'effet de la température et de la triaxialité sur l'évolution des hétérogénéités est caractérisé. Nous proposons une fonction de distribution décrivant la distribution des valeurs locales de  $\sigma_I$  en fonction des contraintes principales et équivalente  $\langle \sigma_I \rangle$  et  $\langle \sigma_{mises} \rangle$  moyennes dans la microstructure.

Cette fonction est utilisée pour formuler un modèle d'approche locale de la rupture intégrant la distribution des tailles de défauts critiques et les distributions de  $\sigma_I$ . On montre que dans certains cas, la dispersion des contraintes locales suffit à expliquer les dispersions des contraintes à rupture à l'échelle du volume élémentaire. Les dispersions de contraintes à rupture sont en accord avec celles prédites par le modèle de Beremin. La prise en compte des hétérogénéités mécaniques permet d'introduire une dépendance de la probabilité de rupture en fonction de la température, de la déformation et de la triaxialité. Il reste à appliquer le modèle d'approche locale au calcul d'éprouvettes CT et de comparer les dispersions de ténacités simulées à celles mesurées expérimentalement.



---

# SOMMAIRE

<b>I. Introduction générale.....</b>	<b>9</b>
I.A Contexte industriel .....	11
I.B Enjeu : prise en compte de l'effet des hétérogénéités mécaniques sur la rupture par clivage .....	12
I.C Démarche adoptée : approche à l'échelle de la plasticité cristalline .....	13
<b>II. Etude bibliographique du comportement plastique et de la microstructure des aciers faiblement alliés.....</b>	<b>17</b>
Introduction .....	22
II.A Rappels bibliographiques sur le comportement à l'échelle microscopique dans les métaux de structure cubique centrée .....	22
II.B Quelques approches de modélisation de plasticité cristalline dans les métaux de structure cubique centrée .....	26
II.C Rappels bibliographiques concernant la microstructure des aciers faiblement alliés .....	45
Conclusion du chapitre II .....	52
<b>III. Caractérisation expérimentale.....</b>	<b>57</b>
Introduction .....	59
III.A Caractérisation microstructurale du matériau .....	59
III.B Essais de traction monotone .....	66
III.C Caractérisation du comportement thermiquement activé.....	72
III.D Caractérisation de la transition ductile / fragile.....	82
III.E Etude fractographique .....	93
Conclusion du chapitre III.....	99



---

## **IV. Formulation et identification d'un modèle de comportement micromécanique.....103**

IV.A	Choix d'un modèle de comportement 'basse température' de l'acier de cuve..	105
IV.B	Implémentation numérique des équations du modèle .....	111
IV.C	Identification des paramètres du modèle .....	119
	Conclusion du chapitre IV .....	135

## **V. Simulation numérique des hétérogénéités mécaniques dans la microstructure bainitique.....141**

	Introduction .....	143
V.A	Choix de l'agrégat polycristallin, génération du maillage et conditions aux limites .....	144
V.B	Etude numérique qualitative de le l'effet de $\langle \sigma_I \rangle$ , $T$ et $\chi$ sur l'évolution des hétérogénéités locales .....	149
V.C	Quantification des hétérogénéités : identification de fonctions mathématiques de distribution de $\sigma_I$ à partir des résultats de simulation numérique .....	158
	Conclusion du chapitre V .....	168

## **VI. Prise en compte des hétérogénéités mécaniques dans un modèle d'approche locale de la rupture par clivage.....171**

	Introduction .....	174
VI.A	Etude bibliographique des mécanismes de rupture par clivage dans les aciers faiblement alliés .....	174
VI.B	Les théories d'approche locale de la rupture.....	187
VI.C	Formulation d'un modèle statistique de rupture par clivage basé uniquement sur les hétérogénéités de $\sigma_I$ dans la microstructure .....	197
VI.D	Application d'un critère d'amorçage du clivage tenant compte des hétérogénéités de $\sigma_I$ et de la distribution des tailles de carbures.....	206
	Conclusion du chapitre VI.....	221

## **Annexes.....237**

## Chapitre I

### **Introduction générale**

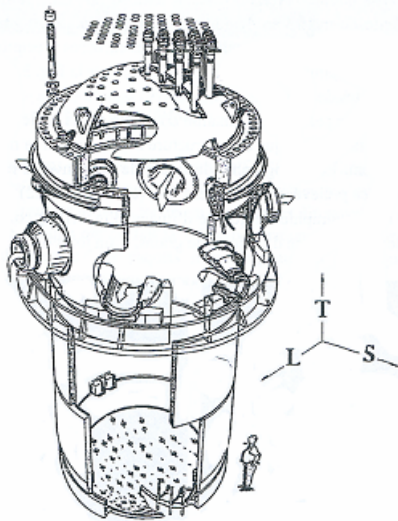
## TABLE DES MATIÈRES

### I. Chapitre I : Introduction générale

I.A	Contexte industriel .....	11
I.B	Enjeu : prise en compte de l'effet des hétérogénéités mécaniques sur la rupture par clivage .....	12
I.C	Démarche adoptée : approche à l'échelle de la plasticité cristalline .....	13
	Références bibliographiques .....	15

## I.A Contexte industriel

Dans les centrales nucléaires, les cuves de réacteur à eau pressurisée (REP) constituent un des éléments de la seconde barrière de sûreté entre les crayons de combustible radioactif et l'environnement extérieur. La cuve est constituée de divers éléments d'un acier faiblement allié de nuance 16MND5 (équivalent A508 C13). Ces éléments sont forgés puis assemblés par soudage. Dans un réacteur REP de 900 MW, la cuve mesure environ 13 mètres de haut et 4 mètres de diamètre, pour une masse totale d'environ 330 tonnes.



**Fig. I.1 :** Vue d'une cuve de Réacteur à Eau Pressurisée (REP)

Dans un régime de fonctionnement normal, la cuve est soumise à une pression de l'ordre de 15 MPa et une température de 290°C : il ne peut pas y avoir de phénomène de rupture fragile. Cependant, il est crucial de garantir l'intégrité de la cuve en cas de fonctionnement accidentel : l'accident de perte de réfrigérant primaire (APRP) entraînerait l'injection d'eau à température ambiante dans la cuve, ce qui conduirait à un refroidissement brutal de celle-ci. Le matériau de la cuve étant soumis à l'irradiation en conditions de service, le refroidissement brutal peut favoriser la rupture fragile pour des températures plus élevées qu'à l'état non irradié [BOU06].

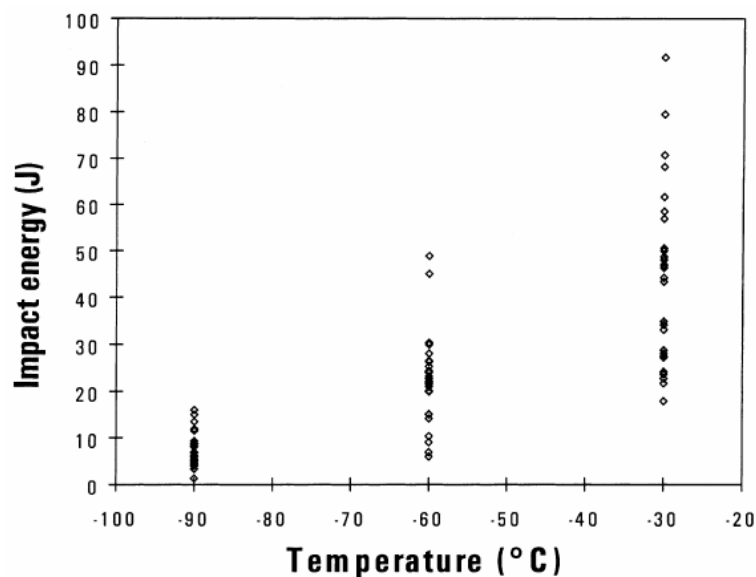
En amont des problématiques industrielles de l'énergie nucléaire, de nombreux travaux de recherche ont ainsi été engagés : ils portent notamment sur la compréhension et la modélisation des mécanismes de rupture fragile dans les aciers faiblement alliés. Le Commissariat à l'Énergie Atomique (CEA) et Electricité de France (EDF) ont soutenu plusieurs travaux de thèse sur ce thème (Renevey [REN98], Carassou [CAR99], Tanguy [TAN01], Hausild [HAU02], Pesci [PES04], Sekfali [SEK04], Mathieu [MAT06]). Cette thèse, financée par le CEA, s'inscrit dans cette démarche de compréhension des mécanismes à l'origine de la rupture fragile par clivage. Mes travaux ont également été associés au projet européen PERFECT (*Prediction of Irradiation Damage Effect in Reactor Components*), qui vise à étudier les propriétés de l'acier 16MND5 aux échelles allant de la simulation atomistique au calcul de la structure. Les résultats de la modélisation à une échelle donnée fournissent des données d'entrée à l'échelle supérieure.

## I.B Enjeu : prise en compte de l'effet des hétérogénéités mécaniques sur la rupture par clivage

Le principal objectif de cette thèse est d'étudier l'effet des mécanismes locaux de déformation à l'échelle microscopique sur la rupture fragile dans un acier faiblement allié A508 C13 fourni par le CEA.

Aux basses températures, les aciers faiblement alliés présentent une rupture fragile par clivage intragranulaire. Ces mécanismes sont bien identifiés à l'échelle microscopique dans le fer  $\alpha$ . Cependant, l'étude de la rupture fragile pose deux problèmes majeurs dans les aciers faiblement alliés :

- D'une part, les dispersions de valeurs de résiliences et de ténacité sont élevées, et elles augmentent fortement avec la température à l'approche du domaine de transition ductile / fragile (cf. figure I.2). Si cet aspect statistique peut être reproduit par des modèles classiques d'approche locale, les phénomènes à l'origine de ces dispersions sont encore mal identifiés.



**Fig. I.2 :** Evolution de la dispersion des valeurs de résilience dans le domaine de transition ductile / fragile pour un acier 16MND5 [MÄN99]

- D'autre part, lors de l'élaboration des constituants de la cuve, les traitements de trempe sont à l'origine d'hétérogénéités microstructurales entre la peau externe du matériau (bainite inférieure) et le cœur (bainite supérieure). Ces hétérogénéités peuvent être accentuées par les ségrégations en éléments d'alliage et en impuretés héritées de la solidification en lingot. Ces micro-ségrégations peuvent conduire très localement à la présence de zones à microstructure martensitique. Or les propriétés de résilience et ténacité peuvent être très sensibles à ces hétérogénéités microstructurales.

Pour répondre à ces problèmes, plusieurs méthodologies peuvent être adoptées :

- **Une approche macroscopique du comportement couplée à une approche locale de la rupture (Beremin [BER83])** : cette méthodologie permet de décrire les dispersions de ténacités et ce pour différentes microstructures, mais elle ne prend pas en compte les échelles inférieures de description du comportement, et ne permet pas d'interpréter clairement l'origine de ces dispersions.
- **Une approche micromécanique couplée à un critère local de clivage** : cette méthodologie permet de décrire le comportement à l'échelle microscopique et d'accéder aux hétérogénéités locales de champs mécaniques. Il s'agit d'une approche coûteuse en temps de calcul, mais pouvant aider à la compréhension des phénomènes à l'origine de la rupture macroscopique. L'effet de la microstructure y est introduit de façon explicite, et ce type d'approche permet d'étudier la part des hétérogénéités mécaniques dans les dispersions des valeurs de résilience et de ténacité d'un acier de cuve. La dépendance en température de ces mécanismes de déformation est également prise en compte. Par ce type d'approche, Mathieu montre que la dispersion de contraintes à rupture à l'échelle microscopique peut être interprétée comme la combinaison des dispersions de tailles de défauts et de contraintes locales [MAT06].

## **I.C Démarche adoptée : approche à l'échelle de la plasticité cristalline**

Dans le cadre de cette thèse, nous avons adopté une approche micromécanique couplée à un critère local de clivage.

Les aciers faiblement alliés, que ce soit à l'état bainitique ou martensitique, sont constitués d'un ensemble de lattes présentant une structure essentiellement de nature cubique centrée (C.C.). Or, les mécanismes de plasticité microscopique mis en jeu dans ces métaux sont fortement dépendants de la température : certains aspects de ces mécanismes restent assez mal connus. De plus, il convient d'établir dans quelle mesure la microstructure de l'acier de cuve peut altérer ces mécanismes.

Le **chapitre II** fait l'objet d'une étude bibliographique sur les mécanismes locaux de déformation dans les métaux de structure C.C. et sur les modélisations microscopiques du comportement. On présente également les caractéristiques microstructurales de la bainite et de la martensite dans les aciers faiblement alliés.

Deux microstructures, l'une bainitique et l'autre martensitique sont élaborées par traitement thermique. Le **chapitre III** présente une caractérisation expérimentale des deux microstructures et de leur comportement à différentes échelles. L'effet de la température et de la microstructure est également étudié :

- Les microstructures bainitique et martensitique sont caractérisées par EBSD et au MET.
- Des essais mécaniques réalisés dans le domaine de température [25°C, -196°C] visent à caractériser l'évolution du module d'écrouissage en température.
- Des essais de sauts de vitesse et de sauts de température permettent également d'étudier le comportement activé thermiquement.

- Afin de caractériser l'évolution de la ténacité en fonction de la température, des essais sur éprouvettes CT sont réalisés : une étude fractographique est entreprise pour identifier les mécanismes et les sites d'amorçage de la rupture.

Le **chapitre IV** propose un modèle de comportement micromécanique prenant en compte les mécanismes de plasticité intervenant aux basses températures dans les aciers faiblement alliés. L'écriture du modèle en grandes transformations et le schéma d'intégration numérique sont également présentés.

La procédure d'identification du modèle pour la bainite est également décrite : la méthodologie consiste à déterminer expérimentalement les paramètres 'physiques' (essais mécaniques, observations EBSD et MET) puis à identifier les paramètres restants par méthode inverse à partir des essais mécaniques.

En conclusion, nous présentons une démarche d'identification optimisée, applicable à d'autres microstructures (martensite) ou d'autres aciers de cuve.

Le **chapitre V** décrit la modélisation des champs locaux dans la microstructure bainitique. Les conditions aux limites sont imposées de façon à reproduire le chargement rencontré dans une éprouvette CT en fond de fissure.

On étudie l'évolution des hétérogénéités de déformation, de contraintes principales et de contraintes de clivage dans deux agrégats polycristallins bainitiques de  $200 \times 200 \times 3 \mu\text{m}^3$ . L'étude est réalisée pour deux microstructures différentes.

Une fonction mathématique de distribution des contraintes principales est identifiée à partir des résultats de simulation numérique.

Le chapitre VI fait d'abord l'objet d'une revue bibliographique des mécanismes de rupture par clivage dans les aciers ainsi que des modèles d'approche locale de la rupture. Par la suite, deux modèles de rupture fragile par clivage sont proposés à l'échelle du volume élémentaire :

- Dans un premier temps, la distribution des tailles de défauts est négligée et le critère de clivage est supposé déterministe : la fonction statistique identifiée dans le chapitre V est utilisée pour formuler un critère d'amorçage de la rupture fondé uniquement sur les hétérogénéités mécaniques. Cette approche vise à étudier la part des hétérogénéités mécaniques dans les dispersions de contrainte à rupture.
- Dans un second temps, une fonction de distribution des tailles de défauts est introduite dans le critère de rupture. Cette approche permet de relier la description du comportement à l'échelle microscopique, les micromécanismes de rupture par clivage et la distribution des tailles de défauts pour calculer une probabilité de la rupture à l'échelle du maillon de l'approche locale.

La **conclusion** constitue une synthèse des principaux résultats présentés dans le manuscrit. Quelques perspectives et pistes d'amélioration sont proposées concernant la caractérisation des matériaux, la modélisation du comportement et l'approche micromécanique de la rupture.

## Références bibliographiques

[BOU05] BOUCHET (C.), TANGUY (B.), BESSON (J.), BUGAT (S.) – *Prediction of the effects of neutron irradiation on the Charpy ductile to brittle transition curve of an A508 pressure vessel steel*. Computational Materials Science, vol. n°32, Issues 3-4, pp. 294-300, 2005.

[CAR99] CARASSOU (S.) – *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, 1999.

[HAU02] HAUSILD (P.) – *Transition ductile / fragile dans un acier faiblement allié*. Thèse de Doctorat, Ecole Centrale Paris, 2002.

[MÄN99] MÄNTYLÄ (M.), ROSSOL (A.), NEDBAL (I.), PRIOUL (C.), MARINI (B.) – *Fractographic observations of cleavage fracture initiation in a bainitic A508 steel*. Journal of Nuclear Materials, vol. n°264, pp. 257-262, 1999.

[MAT06] MATHIEU (J. P.) – *Analyse et modélisation micromécanique du comportement et de la rupture fragile de l'acier 16MND5 : prise en compte des hétérogénéités microstructurales*. Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Arts et Métiers, CER de Metz, 2006.

[PES04] PESCI (R.) – *Etude micromécanique et caractérisation expérimentales du comportement et de l'endommagement de l'acier de cuve 16MND5 à basses températures*. Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Arts et Métiers, CER Metz, 2004.

[REN98] RENEVEY (S.) – *Approches globale et locale de la rupture dans le domaine de transition ductile-fragile d'un acier faiblement allié*. Thèse de Doctorat, Université Paris XI Orsay / CEA.

[SEK04] SEKFALI (S.) – *Influence de la microstructure sur le comportement local dans les aciers 16MND5*. Thèse de Doctorat, Ecole Centrale Paris, 2004.

[TAN01] TANGUY (B.) – *Modélisation de l'essai Charpy par l'approche locale de la rupture. Application au cas de l'acier 16MND5 dans le domaine de la transition*. Thèse de Doctorat, Ecole Centrale des Mines, 2001.





## Chapitre II

### **Etude bibliographique du comportement plastique et de la microstructure des aciers faiblement alliés**

## TABLE DES MATIÈRES

### II. Etude bibliographique du comportement plastique et de la microstructure des aciers faiblement alliés

Table des notations.....	19
Introduction .....	22
<b>II.A Rappels bibliographiques sur le comportement à l'échelle microscopique dans les métaux de structure cubique centrée .....</b>	<b>22</b>
II.A.1 Géométrie du glissement .....	22
II.A.2 Influence de la température sur le comportement plastique .....	23
II.A.3 Influence d'autres paramètres .....	25
<b>II.B Quelques approches de modélisation de plasticité cristalline dans les métaux de structure cubique centrée .....</b>	<b>26</b>
II.B.1 Modélisations de plasticité cristalline 'haute température' .....	26
II.B.2 Modélisations phénoménologiques de la plasticité 'basse température' .....	33
II.B.3 Modélisation 'basse température' intégrant les densités de dislocations comme variables internes d'écroutissage (Rauch [RAU93]) .....	37
II.B.4 Approche probabiliste de l'écroutissage 'basse température' : modèle de Stainier, Cuitiño, Ortiz [STA02] .....	43
<b>II.C Rappels bibliographiques concernant la microstructure des aciers faiblement alliés .....</b>	<b>45</b>
II.C.1 Les transformations displacives .....	46
II.C.2 La martensite .....	48
II.C.3 La bainite .....	49
II.C.4 Diffusion du carbone et formation des précipités .....	50
<b>Conclusion du chapitre II .....</b>	<b>52</b>
<b>Références bibliographiques .....</b>	<b>54</b>

## Table des notations

### Dislocations :

- $b$  : vecteur de Burgers.
- $\rho$  : densité totale de dislocations.
- $\rho^s$  : densité de dislocations sur le système ( $s$ ).
- $\rho_m^s$  : densité de dislocations mobiles sur le système ( $s$ ).
- $\rho_i^s$  : densité de dislocations immobiles sur le système ( $s$ ).
- $\rho_s$  : densité de dislocations vis.
- $r_{ma}^s$  : taux d'annihilation des dislocations mobiles appartenant au système ( $s$ ).
- $r_a^s$  : taux d'immobilisation des dislocations appartenant au système ( $s$ ).
- $r_{ia}^s$  : taux d'annihilation des dislocations immobiles appartenant au système ( $s$ ).
- $g_c = 2 y_c$  : distance caractéristique d'annihilation entre dislocations.
- $\Lambda$  : libre parcours moyen de l'ensemble des dislocations.
- $\Lambda^s$  : libre parcours moyen des dislocations sur le système ( $s$ ).
- $L_0$  : distance entre les deux arbres de la forêt constituant un obstacle.
- $L$  : longueur de segment vis entre les deux arbres de la forêt constituant un obstacle.
- $dA$  : aire balayée lors de l'avancée d'une dislocation vis.

### Activation thermique :

- $T_a$  : température de transition de comportement (début du palier athermique).
- $\nu_D$  : fréquence de Debye
- $\nu_S$  : fréquence de formation d'un double décrochement
- $\nu_s$  : vitesse d'avancée des dislocations vis par mécanisme de double décrochement.
- $V^*$  : Volume d'activation
- $m = \frac{\tau_\mu^s V^*}{kT}$  : coefficient de sensibilité à la vitesse
- $\Delta G(\tau)$  : énergie libre d'activation
- $\Delta G_0$  : hauteur de la barrière énergétique associée au mécanisme d'activation thermique
- $\dot{\gamma}_0^s = \rho_m^s b^2 \nu_D$  : vitesse de glissement de référence
- $p, q$  : paramètres liés au profil de la barrière d'énergie (Kocks [KOC75])
- $l_c$  : longueur caractéristique d'un double décrochement.
- $l_p$  : distance séparant 2 vallées de Peierls

### Déformations :

- $\gamma^s$  : glissement plastique sur le système ( $s$ ).
- $\dot{\gamma}^s$  : vitesse de glissement plastique sur le système ( $s$ ).
- $\varepsilon_{eq}^p$  : déformation plastique équivalente au sens de von Mises.
- $\gamma = \sum_{u=1}^{24} |\gamma^u|$  : glissement plastique cumulé sur tous les systèmes de glissement.

### Contraintes :

- $\sigma$  : Contrainte d'écoulement (au sens de Cauchy) ;
- $\sigma_0$  : Contribution des précipités et des atomes en solution à la contrainte d'écoulement
- $\sigma_s(\dot{\epsilon}, T)$  : contrainte seuil intégrant la friction de réseau et les atomes en solution [RAU93] ;
- $\tau$  : cission résolue ;
- $\tau^s$  : cission résolue sur le système de glissement ( $s$ ) ;
- $\tau^{sat}$  : cission d'écoulement à saturation de l'écrouissage ;
- $\tau_{eff}$  : cission effective ;
- $\tau_{eff}^s$  : cission effective sur le système ( $s$ ) ;
- $\tau_\mu$  : cission athermique ;
- $\tau_\mu^s$  : cission athermique sur le système ( $s$ ) ;
- $\tau_c^s$  : cission critique initiale sur le système ( $s$ ) ;
- $\tau_0$  : contribution des éléments en solution et précipités à la contrainte critique d'activation ;
- $\tau_0^m$  : contribution des éléments en solution et précipités à la contrainte critique d'activation sur les segments mixtes ;
- $\tau_0^v$  : contribution des éléments en solution et précipités à la contrainte critique d'activation sur les segments vis ;
- $\tau_{0c}$  : cission critique initiale (matériau pur) ;
- $\tau_i$  : cission résolue interne ;
- $\tau_R$  : cission maximale nécessaire pour vaincre la friction de réseau.

### Ecrouissage :

- $h$  : matrice d'écrouissage ;
- $h^{su}$  : coefficient de  $h$  relatif à l'interaction entre les systèmes ( $s$ ) et ( $u$ ) ;
- $h(\gamma)$  : fonction d'écrouissage utilisée pour calculer la matrice  $h$  [PAN83] ;
- $M$  : coefficient de Taylor ;
- $\alpha$  : terme d'interaction globale entre les différents systèmes dans la relation  $\sigma = \alpha \mu b \sqrt{\rho}$  [MEC81] ;
- $h_0$  : fonction d'écrouissage intervenant dans l'expression de  $h$  (modèles d'Asaro, de Kocks et Kalidindi [PEI83], [KOC76], [BHA01]) ;
- $\tau^\alpha$  : constante matériau du modèle d'écrouissage de Kalidindi [BHA01] ;
- $H^0, \tau_{sat}^0, \dot{\gamma}^0$  : coefficients du modèle d'écrouissage de Kocks [KOC76] ;
- $r^s$  : variable d'écrouissage isotrope ;
- $x^s$  : variable d'écrouissage cinématique ;
- $C, r_0, d$  : paramètres matériau de la loi d'écrouissage de Cailletaud [CAI87] ;
- $h_1, h_2$  : paramètres de la matrice d'écrouissage de Mandel ;
- $a^{su}$  : matrice d'interaction de Franciosi reliant  $\tau_c^s$  à  $\rho^u$  ;
- $k_1, k_2$  : paramètres matériau de la loi d'écrouissage de Estrin, Mecking & Kocks [MEC81](évolution des densités de dislocations) ;

- $K$  : terme de sources de dislocations dans la loi d'évolution de  $\rho^s$  du modèle de Tabourot [TAB92] ;

## Introduction

Dans le cadre de la compréhension et de la modélisation des hétérogénéités de champs mécaniques dans les aciers faiblement alliés, il est primordial de prendre en compte le comportement plastique de la matrice ferritique et les spécificités de la microstructure.

Le **chapitre II** est divisé en trois parties :

- La partie **II.A** fait l'objet d'une étude bibliographique des mécanismes et de plasticité cristalline dans les métaux de structure cubique centrée.
- En seconde partie (**II.B**), on propose une revue des principaux modèles de comportement à l'échelle microscopique dans ces matériaux.
- Enfin le sous-chapitre **II.C** rappelle les spécificités des microstructures bainitique et martensitique rencontrées dans les aciers faiblement alliés.

### II.A Rappels bibliographiques sur le comportement à l'échelle microscopique dans les métaux de structure cubique centrée

Les aciers faiblement alliés, que ce soit à l'état bainitique ou martensitique, sont constitués d'un ensemble de lattes présentant une structure essentiellement de nature cubique centrée (C.C.). Contrairement aux métaux de structure C.F.C. dans lesquels les mécanismes de plasticité sont connus, les mécanismes mis en jeu dans les métaux C.C. sont mal connus et sont fortement dépendants de la température.

#### II.A.1 Géométrie du glissement

Pour les matériaux C.C., les directions de glissement sont les directions denses de la maille cristalline, à savoir les directions du type  $\langle 111 \rangle$ .

Par contre, les plans de glissement sont mal définis. L'hypothèse la plus couramment évoquée est celle de Taylor et Elam [TAY26] : ils envisagent le glissement des matériaux C.C. comme celui d'un paquet de crayons hexagonaux glissant les uns par rapport aux autres (modèle du *pencil glide*). Cette hypothèse implique que le glissement s'effectue sur le plan soumis à la cisssion résolue maximale. La surface de glissement correspond alors à un cylindre généré autour d'une direction de glissement de type  $\langle 111 \rangle$ .

D'après Barrett [BAR37], le glissement s'effectue sur des plans de faible indice, tels que les plans de la famille  $\{110\}$ ,  $\{112\}$  et  $\{123\}$ . Jaoul et Gonzales [JAO60] ont montré que le plan de glissement activé était toujours situé à moins de  $2^\circ$  du plan de cisssion maximale, ce qui tend à confirmer l'hypothèse émise par Taylor.

Franciosi [FRA83] a montré que la géométrie du glissement du fer- $\alpha$  pouvait en grande partie se résumer à l'activation de deux familles de systèmes : les systèmes  $\{110\} \langle 111 \rangle$  et  $\{112\}$

$\langle 111 \rangle$ , soit 24 systèmes de glissement. L'observation de lignes de glissement sinueuses a révélé la présence d'une succession de micro-glissements sur des plans  $\{110\}$  et  $\{112\}$ . L'activation de plans  $\{123\}$  mise en évidence par cet auteur, a été considérée par d'autres comme étant une combinaison des deux familles de plans cités précédemment.

### II.A.2 Influence de la température sur le comportement plastique

Le comportement des matériaux de structure C.C. est fortement dépendant de la température. Il existe une température de transition de comportement  $T_a$  (de l'ordre de l'ambiante pour les aciers faiblement alliés), au dessus de laquelle leur comportement plastique est très comparable à celui des C.F.C. On retrouve alors, pour des monocristaux orientés en glissement simple et déformés en traction simple, les trois stades de comportement plastique tout à fait typiques des métaux C.F.C (cf. figure II.1) :

- **Stade I** : le glissement est activé sur le système (dit primaire) soumis à la plus grande cission résolue. Les dislocations ne rencontrant que peu d'obstacles, le taux d'écroutissage est relativement faible (de l'ordre de  $\mu/250$ ). La déformation plastique s'accompagnant d'une rotation de réseau cristallin, un second système (dit secondaire) commence à s'activer et un réseau de dislocations secondaires se met alors en place.
- **Stade II** : les interactions élastiques entre les réseaux de dislocations primaire et secondaire entraînent une augmentation du taux d'écroutissage. La structure de dislocations, initialement unidirectionnelle, devient alors bidimensionnelle, du fait de l'activation d'un second système de glissement.
- **Stade III** : l'annihilation des dislocations de polarité opposée et l'apparition du glissement dévié conduisent à une diminution du taux d'écroutissage. Plus la température augmente et plus la déformation pour laquelle le stade III apparaît est faible.

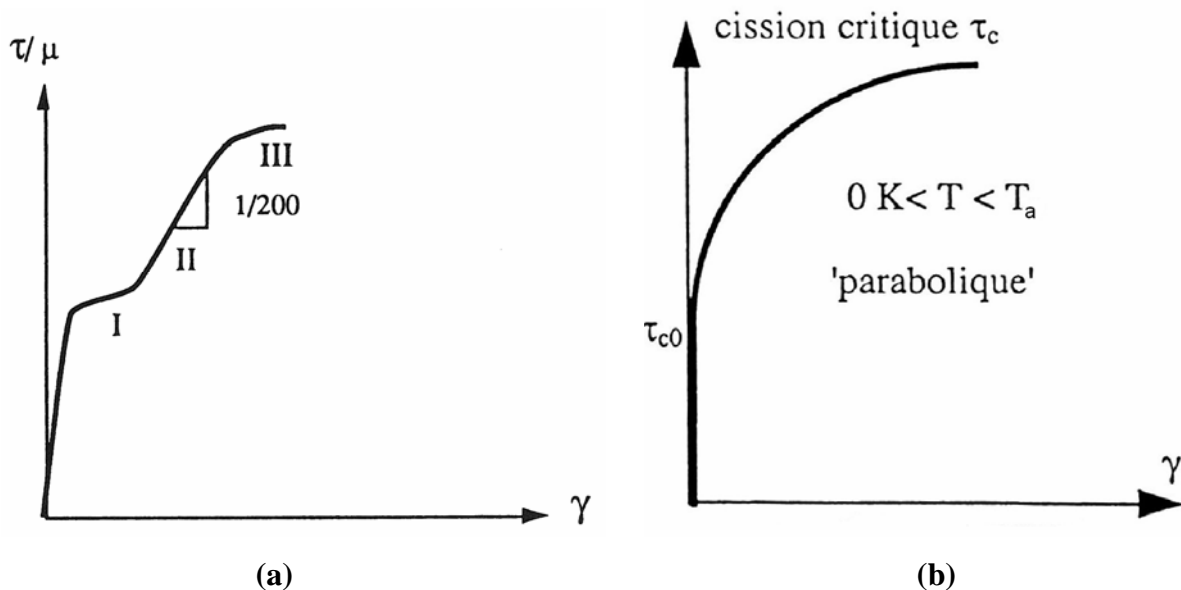


Fig. II.1 : Courbes de traction du monocristal C.C pour  $T > T_a$  (a) et  $T < T_a$  (b)

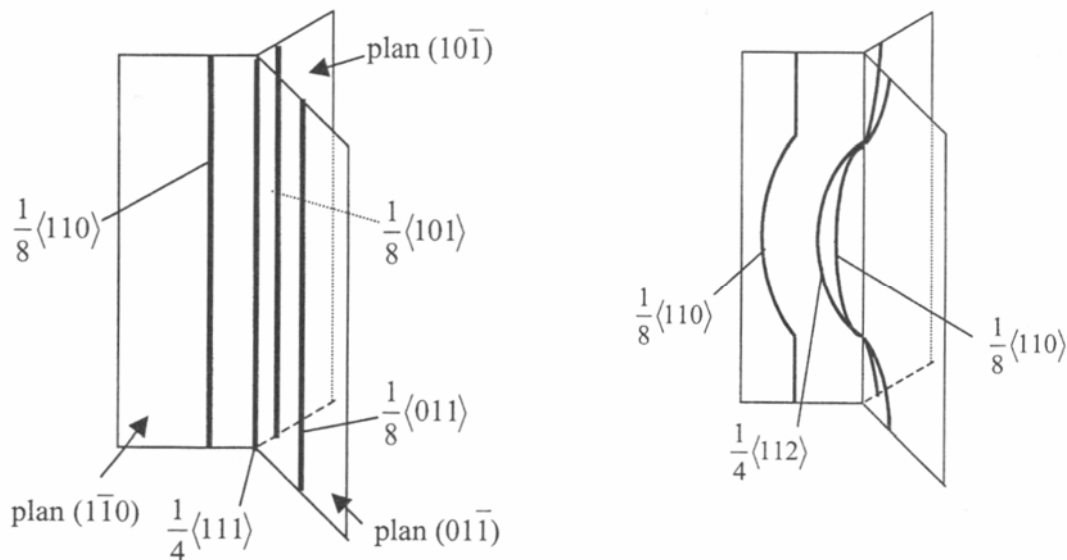


Dans les polycristaux, le stade I n'est jamais observé. En effet, les incompatibilités de déformation peuvent conduire à l'activation de plusieurs systèmes de glissement.

En dessous de la température  $T_a$ , le comportement se traduit par une courbe d'écroutissage présentant un taux d'écroutissage initial élevé qui décroît avec la déformation (Fig. II.1). De plus, on observe des lignes de glissement moins sinueuses qu'au dessus de la température de transition, ainsi que l'apparition d'un nouveau mécanisme de déformation, le maillage. Le comportement plastique du fer- $\alpha$  est piloté par le déplacement des dislocations vis, celles-ci étant beaucoup moins mobiles que les dislocations coins. Enfin le glissement est surtout contrarié par les interactions à courte distance (friction de réseau) et se fait par un phénomène de double décrochement que nous décrirons plus loin.

Pour expliquer la faible mobilité des dislocations vis, la théorie de la dissociation de cœur des dislocations vis a été introduite par Hirsch [HIR60]. On considère qu'à l'état d'équilibre, une dislocation vis se dissocie sur plusieurs plans non parallèles (figure II.2).

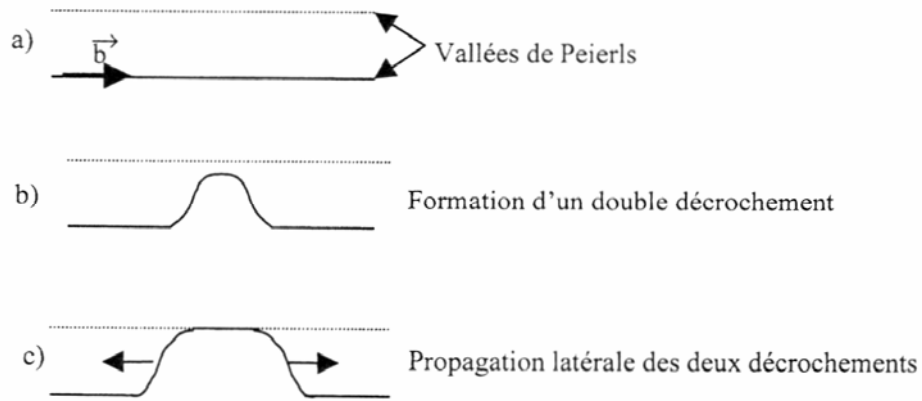
Si cette dissociation permet de minimiser l'énergie de ligne, elle rend les dislocations vis sessiles : la dislocation doit se recombiner dans un seul plan pour permettre le glissement. Cette recombinaison est un phénomène thermiquement activé, ce qui signifie qu'elle est rendue d'autant plus difficile que la température diminue.



**Fig. II.2 :** Structure de cœur des dislocations vis : dissociation / recombinaison

Par ailleurs, les dislocations, de par l'arrangement des atomes du réseau, sont soumises à des forces à courte distance s'opposant à leur mouvement : on parle alors de friction de réseau. L'énergie de cœur des dislocations est minimale lorsque cette dernière suit les rangées d'atomes du réseau cristallin (ce sont les vallées de Peierls) : pour passer d'une rangée à une autre, les dislocations vis doivent par conséquent franchir une barrière énergétique. Cette barrière est difficile à franchir dans les matériaux C.C. comme le fer- $\alpha$  à cause de l'arrangement des atomes.

Le franchissement des pics de Peierls sous l'effet d'une contrainte se fait par un mécanisme de double décrochement (Fig. II.3) : une dislocation vis franchit la barrière entre deux vallées en formant deux décrochements à caractère coin qui, s'ils tendent à s'annihiler mutuellement à l'équilibre, vont par contre se séparer facilement sous l'action d'une contrainte.



**Fig. II.3 :** Franchissement des vallées de Peierls par double décrochement

Il en résulte un passage progressif de la dislocation vis d'une vallée de Peierls à la suivante. Là encore, ce mécanisme de propagation par double décrochement est activé thermiquement. Ainsi, comme à basse température l'apport énergétique dû à l'agitation thermique est très faible, la friction de réseau va gouverner le mouvement des dislocations, les obstacles à plus longue distance tels que les précipités ne jouant pas un rôle majeur.

A l'inverse, à des températures plus élevées ( $T > T_a$ ), l'agitation thermique est suffisante pour faciliter le franchissement des obstacles à courte distance, et en l'absence de précipités, les obstacles de type dislocations gouvernent la plasticité. Le mouvement des dislocations se fait alors par activation de sources de Frank-Read au dessus d'une contrainte critique liée aux obstacles tels que les arbres de la forêt [FRI64].

### II.A.3 Influence d'autres paramètres

#### a) Non respect de la loi de Schmid et asymétrie du glissement :

Pour les métaux présentant une structure C.C., la loi de Schmid est assez bien vérifiée. Cette loi prévoit qu'il y a glissement sur un système ( $s$ ) lorsque la cission résolue sur ce système  $\tau^s$  atteint une valeur critique  $\tau_c^s$  (sur un matériau non écroui, cette valeur est en général indépendante du système de glissement considéré) :

$$|\tau^s| = \tau_c^s \quad (\text{II.1})$$

Pour les métaux C.C, la cission résolue critique initiale est dépendante du système de glissement considéré (Fig. II.4.a), surtout aux basses températures. Les différents systèmes de glissement (il y en a 24 en considérant les plans  $\{110\}$  et  $\{112\}$ ) ne sont pas équivalents.

De plus, pour les systèmes de glissement de la famille  $\{112\}$ , la cission critique d'activation  $\tau_c^s$  dépend du sens de glissement (cf. figure II.4.b). Pour une sollicitation donnée, il faut alors distinguer les systèmes faciles (dits « de maclage ») des systèmes difficiles (dits « d'antimaclage »). Là encore, cette asymétrie du glissement est marquée à froid mais s'estompe au dessus de  $T_a$ .

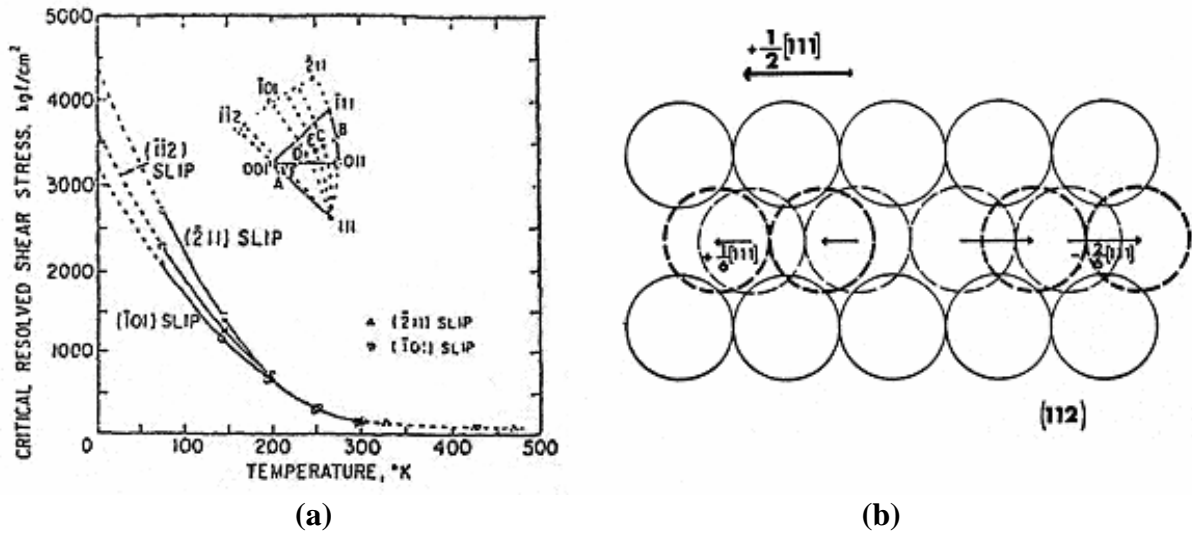


Fig. II.4: Asymétrie du glissement pour  $T < T_a$

### b) Influence de la vitesse de déformation sur le comportement plastique

En vertu du principe d'équivalence temps-température, une augmentation de la vitesse de sollicitation des métaux a des effets comparables à la diminution de la température. Aux faibles températures, Spitzig et Keh [SPI70] ont montré que l'effet de la vitesse de déformation est plus marqué sur les plans de glissement  $\{112\}$  que  $\{110\}$ . A température ambiante, il existe un effet de la vitesse de déformation sur la limite d'élasticité des métaux C.C. Par contre l'érouissage semble assez peu sensible à l'effet de vitesse.

## II.B Quelques approches de modélisation de plasticité cristalline dans les métaux de structure cubique centrée

### II.B.1 Modélisations de plasticité cristalline 'haute température'

Nous présentons les différentes classes de modèles décrivant les mécanismes élémentaires de la plasticité dans les métaux de structure cubique centrée. Ces modèles se situent en général à l'échelle de la dislocation.

#### a) Lois d'écoulement :

##### - Ecoulement plastique :

On considère ici qu'il n'y a pas d'effet de la vitesse de sollicitation sur le comportement du matériau. A température ambiante, l'écoulement plastique obéit au critère de Schmid. Il y a écoulement plastique dès que la cission résolue sur l'un des systèmes de glissement ( $s$ ) atteint une valeur critique :

$$|\tau^s| = \tau_c^s \quad (\text{II.2})$$

$$\text{avec } \left| \dot{\tau}^s \right| = \dot{\tau}_c^s \quad (\text{II.3})$$

La relation (II.3) est justifiée par le fait qu'il est nécessaire que  $\left| \tau^s \right|$  demeure égal à  $\tau_c^s$  suffisamment longtemps pour que le système de glissement ( $s$ ) soit activé.

- Ecoulement viscoplastique :

Les lois d'écoulement viscoplastique les plus communes sont basées sur la théorie du mouvement thermiquement activé des dislocations dans les matériaux de structure C.F.C.. La loi d'écoulement pour un système de glissement ( $s$ ) est alors décrite par la relation :

$$\dot{\gamma}^s = \rho_m^s b^2 \nu_D \exp\left(\frac{-\Delta G_0}{k.T}\right) \left(\frac{\tau^s}{\tau_\mu^s}\right)^{\frac{\tau_\mu^s V^*}{k.T}} \quad (\text{II.4})$$

Avec :

$\rho_m^s$  : densité de dislocations mobiles

$b$  : vecteur de Burgers

$\nu_D$  : fréquence de Debye

$\Delta G_0$  : énergie d'activation relative au franchissement des obstacles

$k$  : constante de Boltzmann T la température

$\tau^s$  et  $\tau_\mu^s$  : cission résolue et contrainte athermique respectivement

$V^*$  : volume d'activation.

Si on pose :

$$n = \frac{\tau_\mu^s V^*}{k.T} \quad (\text{II.5})$$

$$\dot{\gamma}_0^s = \rho_m^s b^2 \nu_D \exp\left(\frac{-\Delta G_0}{k.T}\right) \quad (\text{II.6})$$

On obtient alors la loi d'écoulement :

$$\dot{\gamma}^s = \dot{\gamma}_0^s \left(\frac{\tau^s}{\tau_\mu^s}\right)^n \quad (\text{II.7})$$

Cette loi viscoplastique n'est valable qu'au dessus de la température de transition de comportement. En dessous de cette température, les obstacles ne sont pas de même nature, et une autre modélisation doit être proposée.

**b) Modélisation phénoménologique de l'écrouissage :**

Il existe deux types d'approches dans la modélisation de l'écrouissage du fer- $\alpha$  : les modèles phénoménologiques d'une part et les modèles intégrant les densités de dislocations comme variables internes d'autre part.

Les modèles phénoménologiques sont presque tous basés sur la théorie de la microplasticité de Taylor [TAY38] : cette théorie relie l'incrément de cission critique nécessaire pour activer le glissement sur un système ( $s$ ) au glissement cumulé sur tous les systèmes.

La cission critique s'écrit :

$$\dot{\tau}_c^s = \sum_u h^{su} \dot{\gamma}^u \quad (\text{II.8})$$

Dans une première approche, les termes de la matrice d'écrouissage  $h^{su}$  restent constants au cours de la déformation. On distingue les termes diagonaux de cette matrice  $h^{ss}$  (auto-écrouissage) des termes non diagonaux  $h^{su}$ ,  $s \neq u$  (écrouissage latent). D'autres modèles, plus élaborés, améliorent cette description de l'écrouissage, notamment en introduisant une non linéarité des termes de la matrice d'écrouissage.

- Modèle de Peirce, Asaro et Needleman [PEI83] :

Ce modèle est basé sur celui de Taylor mais il introduit une non linéarité de la matrice  $h$  en fonction de la déformation. Comme dans le modèle de Taylor, on distingue toujours les termes d'auto écrouissage et d'écrouissage latent. Cependant l'écrouissage est ici fonction du glissement cumulé  $\gamma$  sur tous les systèmes actifs.

$$h^{su} = qh(\gamma) + (1-q)h(\gamma)\delta^{su} \quad (\text{II.9})$$

$$\text{Avec } h(\gamma) = h_0 \operatorname{sech}^2 \left( \frac{h_0 \gamma}{\tau^s - \tau_0} \right) \quad (\text{II.10})$$

Dans les équations définissant l'expression de  $h$ ,  $h_0$  correspond à la valeur initiale  $h$ , et  $\tau_0$  la cission résolue critique initiale. Quant au paramètre  $q$ , il caractérise l'importance de l'écrouissage latent par rapport à l'auto-écrouissage. Les valeurs de  $q$  pour ce modèle sont généralement comprises entre 1 et 1.4, ce qui implique une prépondérance de l'écrouissage latent. Cependant, les travaux de Madec, Devincere, Kubin, Hoc et Rodney [MAD03] remettent en cause l'importance relative des deux termes.

D'autres modèles, comme celui de *Kalidindi* [BHA01], reprennent la même description, mais l'évolution de la matrice  $h$  est alors décrite par une fonction puissance :

$$h^{su} = h_0 \left( 1 - \frac{\tau_c^s}{\tau_\alpha} \right)^a \quad (\text{II.11})$$

$h_0$  correspond toujours à la valeur initiale des termes de la matrice  $h$ . Par contre le terme  $\tau_\alpha$  n'a pas de signification physique bien précise. Pour l'aluminium pur, les valeurs de  $h_0$ ,  $\tau_\alpha$  et  $a$  sont prises respectivement égales à 75 MPa, 63 MPa et 2.25.

- Modèle de Kocks [KOC76] :

Ce modèle est aussi fondé sur une description non linéaire de la matrice  $h$ , mais ici tous les termes de la matrice d'érouissage sont identiques et égaux à une fonction  $h_0$  définie par :

$$h_0 = H_0 \left( \frac{\tau_{sat} - \tau_c}{\tau_{sat} - \tau_0} \right) \quad (\text{II.12})$$

$\tau_0$  est la cission critique initiale d'activation (la même pour tous les systèmes),  $H_0$  le module d'érouissage initial et  $\tau_{sat}$  la cission à saturation de l'érouissage, qui est reliée au glissement sur chacun des systèmes par la relation :

$$\tau_{sat} = \tau_{sat}^0 \left( \frac{\sum^s \dot{\gamma}^s}{\dot{\gamma}^0} \right)^m \quad (\text{II.13})$$

$\tau_{sat}^0$ ,  $\dot{\gamma}^0$  et  $m$  sont des paramètres matériau, dont les valeurs sont fixées pour l'aluminium à 61.8 MPa,  $5.0 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$  et 0.005 respectivement.

- Modèle de Cailletaud [CAI87] :

Ce modèle consiste à transposer à l'échelle microscopique les modèles usuels d'érouissage en macroplasticité. Deux variables d'érouissage cinématique  $x^s$  et isotrope  $r^s$  sont ainsi définies :

$$x^s = C \alpha^s \quad (\text{II.14})$$

$$\dot{\alpha}^s = \dot{\gamma}^s - |\dot{\gamma}^s| d \alpha^s \quad (\text{II.15})$$

$$r^s = r_0 + q \sum_{u=1}^N H^{su} \left( 1 - e^{-b \int_0^t |\dot{\gamma}^u| dt} \right) \quad (\text{II.16})$$

Les paramètres  $C$ ,  $r_0$  et  $d$  sont des constantes à déterminer.

La matrice d'érouissage  $H^{su}$  introduite par Mandel [MAN65] est définie par :

$$H^{su} = h_2 + (h_1 - h_2) \delta_{su} \quad (\text{II.17})$$

où  $h_1$  et  $h_2$  désignent deux coefficients matériau.

La loi d'écoulement est alors décrite de la manière suivante :

$$\dot{\gamma}^s = \left( \frac{|\tau^s - x^s| - r^s}{K} \right)^m \text{sign}(\tau^s - x^s) \quad \text{si } \tau^s \geq \tau_c \quad (\text{II.18})$$

$$\dot{\gamma}^s = 0 \quad \text{sinon}$$

**c) Modèles d'écrouissage intégrant  $\rho$  comme variable interne :**

Les modèles phénoménologiques décrivent l'écrouissage comme étant une fonction du glissement cumulé mais il est possible de décrire l'écrouissage à partir d'autres variables telles que les densités de dislocations sur les différents systèmes de glissement. Nous allons donc nous intéresser de façon plus détaillée à cette approche car elle constitue la base théorique de l'outil de simulation d'un agrégat de grains utilisé dans cette étude.

- Modèle d'Estrin, Mecking et Kocks [MEC81] :

Ce modèle est l'un des premiers à avoir introduit une densité de dislocation comme variable d'écrouissage. Il utilise la relation empirique liant la densité de dislocations totale  $\rho$  et la contrainte d'écoulement  $\sigma$ , qui est du type :

$$\sigma = \sigma_0 + M \cdot \alpha \cdot \mu \cdot b \cdot \sqrt{\rho} \quad (\text{II.19})$$

Avec :

$\sigma_0$  : constante prenant en compte la friction de réseau (forces de Peierls).

$M$  : facteur de Taylor moyen.

$\alpha$  : paramètre matériau variant de 0,1 à 0,5 suivant le type d'interaction entre dislocations.

$\mu$  : module de cisaillement.

$b$  : norme du vecteur de Burgers.

Le modèle de Kocks intègre également une équation différentielle régissant l'évolution de la densité de dislocations  $\rho$  en fonction de la déformation plastique équivalente de von Mises  $\varepsilon_{eq}^p$  :

$$\frac{d\rho}{d\varepsilon_{eq}^p} = M(k_1 \sqrt{\rho} - k_2 \rho) \quad (\text{II.20})$$

$k_1$  et  $k_2$  constituent deux paramètres liés au matériau. Le terme  $k_1 \sqrt{\rho}$  correspond à la création de dislocations, tandis que le terme  $k_2 \rho$  est lié à l'annihilation des dislocations. Ce modèle permet de prendre en compte l'interaction entre dislocations mobiles et immobiles, ainsi que l'effet de saturation de l'écrouissage au fur et à mesure de la déformation plastique.

- Modèle de Tabourot [TAB92] :

Ce modèle repose sur les hypothèses du modèle de Kocks. La différence provient de l'introduction des densités de dislocations et des cissons critiques sur chacun des systèmes de glissement.

La cission critique d'activation sur un système donné dépend de la densité de dislocations sur chacun des systèmes de glissement activés. La cission critique  $\tau_c^s$  s'écrit :

$$\tau_c^s = \tau_c^0 + \mu b \sqrt{\sum_u a^{su} \rho^u} \quad (\text{II.21})$$

La matrice  $a^{su}$ , introduite par Franciosi, définit l'interaction entre les différentes familles de systèmes de glissement ( $s$ ) et ( $u$ ).

Afin de décrire l'évolution de la densité de dislocations  $\rho^s$  sur chaque système de glissement ( $s$ ), on doit distinguer les dislocations mobiles et immobiles :

$$\rho^s = \rho_m^s + \rho_i^s \quad (\text{II.22})$$

On considère que les dislocations immobiles prédominent :

$$\rho_i^s \gg \rho_m^s \quad (\text{II.23})$$

L'équation différentielle décrivant l'évolution de la densité de dislocations mobiles fait intervenir trois contributions : la production  $r_p^s$ , l'annihilation  $r_{ma}^s$  et l'immobilisation  $r_i^s$  des dislocations :

$$\dot{\rho}_m^s = r_p^s - r_{ma}^s - r_i^s \quad (\text{II.24})$$

L'évolution de la densité de dislocations immobiles est quant à elle gouvernée par l'immobilisation des dislocations mobiles  $r_i^s$ , ainsi que par l'annihilation des dislocations immobiles  $r_{ia}^s$  :

$$\dot{\rho}_i^s = r_i^s - r_{ia}^s \quad (\text{II.25})$$

$$\text{Avec } r_i^s = \frac{\rho_m^s |\bar{v}^s|}{\Lambda^s} \quad (\text{II.26})$$

$\bar{v}^s$  désignant la vitesse moyenne des dislocations mobiles sur le système ( $s$ ) et  $\Lambda^s$  le libre parcours moyen, c'est à dire la distance parcourue en moyenne par une dislocation avant d'être immobilisée. Ce libre parcours moyen peut être relié à la densité de dislocations perçant le plan de glissement par la relation suivante :

$$\Lambda^s = \frac{K}{\sqrt{\sum_{u \neq s} \rho^u}} \quad (\text{II.27})$$

Il est possible de simplifier l'expression de  $r_i^s$  en utilisant l'équation d'Orowan :

$$|\dot{\gamma}^s| = \rho_m^s b |\bar{v}^s| \quad (\text{II.28})$$

D'où



$$r_i^s = \frac{|\dot{\gamma}^s|}{bA^s} \quad (\text{II.29})$$

Si l'on considère que la densité de dislocation mobile évolue peu ( $\dot{\rho}_m^s \approx 0$ ) et que l'on néglige la densité de dislocations mobiles ( $\rho_i^s \gg \rho_m^s$ ), on obtient :

$$\dot{\rho}^s = \dot{\rho}_i^s \quad (\text{II.30})$$

$$\dot{\rho}^s = \frac{|\dot{\gamma}^s|}{bA^s} - r_{ia}^s \quad (\text{II.31})$$

Essman et Mughrabi [ESS79] ont proposé une loi pour décrire le taux d'annihilation des dislocations immobiles :

$$r_{ia}^s = 2 \frac{y_c}{b} \rho_i^s |\dot{\gamma}^s| \quad (\text{II.32})$$

En combinant les équations (II.24), (II.28), et (II.29), puis en considérant que  $\rho^s \approx \rho_i^s$ , on obtient [TAB98] :

$$\dot{\rho}^s = \frac{|\dot{\gamma}^s|}{b} \left( \frac{\sqrt{\sum_{u \neq s} \rho^u}}{K} - 2y_c \rho^s \right) \quad (\text{II.33})$$

On peut en déduire l'expression de la matrice d'écroissage  $h^{st}$  qui est donnée par la relation :

$$\dot{\tau}_c^s = \sum_u h^{su} |\dot{\gamma}^u| \quad (\text{II.34})$$

D'où

$$h^{su} = \frac{\partial \dot{\tau}_c^s}{\partial |\dot{\gamma}^u|} \quad (\text{II.35})$$

En dérivant l'équation (II.20) par rapport au temps et en utilisant la relation (II.34), l'expression de la matrice d'écroissage  $h^{su}$  peut être obtenue :

$$h^{su} = \frac{\mu a^{su}}{2} \frac{1}{\sqrt{\sum_t a^{st} \rho^t}} \left( \frac{\sqrt{\sum_{t \neq s} \rho^t}}{K} - 2 \frac{y_c}{b} \rho^u \right) \quad (\text{II.36})$$

On peut remarquer que, cette matrice étant fortement non linéaire, elle ne reste pas a priori symétrique au cours de la déformation. Ce modèle, à l'inverse de celui de Kocks, prévoit correctement les 3 stades d'écroissage du monocristal.

## II.B.2 Modélisations phénoménologiques de la plasticité ‘basse température’

### a) Lois d’écoulement activées thermiquement :

La loi de type viscoplastique présentée dans le paragraphe précédent constitue en fait un cas particulier des lois basées sur le mouvement thermiquement activé des dislocations. Dans les métaux de structure C.C. et en dessous de la température de transition de comportement plastique, la plasticité est gouvernée par le franchissement des vallées de Peierls via le mécanisme de double décrochement, qui est lui-même activé thermiquement.

La fréquence  $\nu$  de formation d’un double décrochement de longueur caractéristique  $l_c$  le long d’un segment vis de longueur  $L$  (cf. figure II.5) est donnée par la théorie de l’activation thermique proposée par Kroupa, Friedel et Duesberry [KRO63] :

$$\nu_s = \nu_D \frac{b}{l_c} \frac{L}{l_c} \exp\left[-\frac{\Delta G(\tau_{eff})}{kT}\right] \quad (\text{II.37})$$

Le terme  $\Delta G(\tau_{eff})$  désigne l’énergie d’activation, qui correspond à la hauteur de la barrière énergétique constituée par les vallées de Peierls. Cette énergie dépend de la cission effective  $\tau_{eff}$  définie comme étant la cission appliquée  $\tau$  à laquelle on retranche sa composante athermique  $\tau_\mu$  :

$$\tau_{eff} = \tau - \tau_\mu \quad (\text{II.38})$$

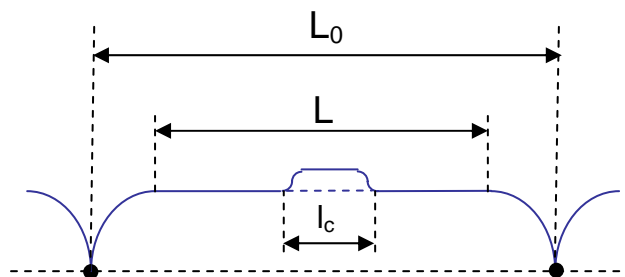


Fig. II.5 : Ancrage d’une dislocation sur des obstacles ( $T < T_a$ )

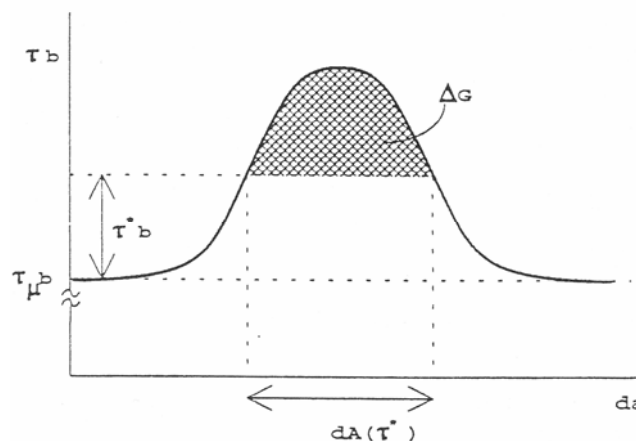


Fig. II.6 : Activation thermique / profil de l’obstacle

La nucléation d'un double décrochement est suivie d'une propagation quasi instantanée de celui-ci le long du segment vis par un effet de tension de ligne. Par conséquent, dès lors qu'un double décrochement a été généré, il y a avancée de l'ensemble du segment vis et la vitesse d'avancée  $v_s$  de ce dernier est donnée par :

$$v_s = v_s b \quad \text{C'est à dire} \quad v_s = v_D \frac{b^2 L}{l_c^2} \exp\left[-\frac{\Delta G(\tau_{eff})}{kT}\right] \quad (\text{II.39})$$

Louchet a montré que s'il y a très peu de segments mixtes, leur vitesse moyenne  $\dot{\gamma}_{mixte}$  est du même ordre que la vitesse  $\dot{\gamma}_s$  des segments vis. Cette propriété tient au fait que le glissement plastique est commandé par la nucléation de doubles décrochements de nature mixte, ce qui implique l'égalité des vitesses des segments vis et mixtes:

$$\dot{\gamma} = \dot{\gamma}_s + \dot{\gamma}_{mixte} \approx 2\rho_m b v_s \quad (\text{II.40})$$

La théorie du mouvement thermiquement activé des segments vis conduit ainsi à une expression du type [LOU78] :

$$\dot{\gamma} = \dot{\gamma}_0 \exp\left[-\frac{\Delta G(\tau_{eff}^s)}{k_B T}\right] \quad \text{Avec} \quad \dot{\gamma}_0 = 2\rho_m v_D b^3 \frac{L^2}{l_c^2} \quad (\text{II.41})$$

L'énergie d'activation liée au mécanisme de double décrochement peut s'exprimer à l'aide du volume d'activation  $V^*$ , qui est défini comme étant la dérivée partielle de l'énergie d'activation par rapport à la cisssion effective :

$$V^* = - \left. \frac{\partial \Delta G}{\partial \tau_{eff}} \right|_{\dot{\epsilon}} \quad (\text{II.42})$$

Si  $V^*$  est constant, l'expression de l'énergie d'activation devient naturellement :

$$\Delta G(\tau_{eff}) = \Delta G_0 - V^* \tau_{eff} \quad (\text{II.43})$$

Le volume d'activation ainsi défini peut, quant à lui, dépendre de la température et de la contrainte effective. Certains auteurs ont proposé des expressions plus explicites de  $\Delta G$  en fonction de  $T$ . Ainsi, si l'on considère un segment vis soumis à une cisssion effective  $\tau_{eff}$ , l'énergie de formation s'écrit [STA02] :

$$\Delta G \approx \Delta G_0 - \tau_{eff} b l_c l_p \quad (\text{II.44})$$

$\Delta G_0$  correspond à l'énergie de formation d'un double décrochement sans l'apport de l'activation thermique,  $l_c$  à la longueur caractéristique du double décrochement et  $l_p$  à la distance séparant deux vallées de Peierls. Cela revient à reprendre l'expression de l'équation (II.42) avec un volume d'activation uniquement fonction des caractéristiques du mécanisme élémentaire de double décrochement et par conséquent, indépendant de  $T$  :

$$V^* = bl_c l_p \quad (\text{II.45})$$

Kocks [KOC75] a proposé une description plus phénoménologique de l'évolution de  $\Delta G$  en fonction de  $\tau_{eff}$ :

$$\Delta G(\tau_{eff}) = \Delta G_0 \left( 1 - \left( \frac{\tau_{eff}}{\tau_R} \right)^p \right)^q \quad (\text{II.46})$$

Cette formulation implique une dépendance en température du volume d'activation  $V^*$ . Le terme  $\Delta G_0$  définit l'énergie d'activation à contrainte effective nulle, c'est-à-dire sans apport de l'activation thermique, tandis que  $\tau_R$  désigne la valeur de la friction de réseau, c'est à dire la cission à fournir pour franchir à coup sûr une vallée de Peierls (avec ou sans apport de l'activation thermique). Les paramètres  $p$  et  $q$  sont reliés au profil des obstacles, ou autrement dit à la profondeur des vallées de Peierls.

### **b) Lois phénoménologiques d'écrouissage 'basse température' :**

- Modèle de Estrin, Mecking et Kocks modifié par Rauch [RAU93] :

Le modèle de Estrin, Mecking et Kocks, dit 'modèle à un paramètre', peut constituer une base intéressante à l'écriture d'une loi spécifique aux métaux C.C. : en effet, il s'applique aisément aux polycristaux et il ne fait dépendre l'écrouissage que de la densité de dislocations moyenne  $\rho$ . Une première approche consiste à introduire dans ce modèle les spécificités inhérentes au comportement à basse température. Lorsque la température est suffisamment basse pour que l'effet de la friction de réseau sur les dislocations vis se manifeste (de l'ordre de  $T_f/10$  pour le fer pur), l'écrouissage du monocristal est profondément modifié : on observe par exemple au M.E.T. des segments vis très droits. Rauch propose donc d'écrire une loi d'écrouissage phénoménologique du type :

$$\sigma = \sigma_s(\dot{\epsilon}, T) + \alpha \mu b M \sqrt{\rho} \quad (\text{II.47})$$

Où  $b$  correspond au vecteur de Burgers,  $\mu$  au module de cisaillement,  $M$  au facteur de Taylor moyen, et  $\alpha$  à une constante liée aux interactions entre dislocations. Le terme  $\sigma_s$  correspond à une contrainte seuil incluant à la fois l'effet de la friction de réseau et des solutés sur le mouvement des dislocations et il dépend fortement de  $\dot{\epsilon}$  et  $T$ . Le second terme 'classique' est lié aux interactions de type forêt. Il s'agit d'un terme d'écrouissage qui évolue avec la déformation (à travers  $\rho$ ) et ne dépend que faiblement de la température (à travers le module élastique de cisaillement).

Comme pour les métaux C.F.C, la loi d'évolution des densités de dislocations résulte de la compétition entre les mécanismes de production et d'annihilation de dislocations :

$$\frac{d\rho}{d\gamma} = \frac{1}{b\lambda} - f(\dot{\epsilon}, T)\rho \quad (\text{II.48})$$

Où  $\gamma$  désigne le glissement cumulé sur tous les systèmes et  $f(\dot{\epsilon}, T)$  un paramètre relié à l'efficacité des mécanismes d'annihilation, que l'on suppose ici fonction de la température et

de la vitesse de déformation.  $\Lambda$  correspond au libre parcours moyen. Ce terme est supposé constant car on considère que seuls les joints de grains constituent des obstacles au mouvement des dislocations.

Les équations (II.46) et (II.47) conduisent finalement à une expression analytique de la loi de comportement :

$$\sigma = \sigma_s + \alpha \mu b M \sqrt{\frac{1}{bf\Lambda} [1 - \exp(-fM\epsilon)]} \quad (\text{II.49})$$

Il est possible d'en déduire l'expression du taux d'érouissage  $\theta$  :

$$\theta = \frac{d\sigma}{d\epsilon} = \frac{\alpha \mu M^2}{2} \left[ \frac{1}{\sqrt{\rho\Lambda}} - bf\sqrt{\rho} \right] \quad (\text{II.50})$$

Les valeurs des différents paramètres du modèle ont été identifiées à partir de courbes  $\theta = \theta(\sigma)$  déduites d'essais de cisaillement réalisés par Keh & Weissmann [KEH63] (tableau II.1).

Il faut noter qu'avec cette description phénoménologique et en considérant  $\Lambda$  constant, la limite d'élasticité suit une relation de type Hall-Petch ; en début de déformation, elle s'écrit :

$$\sigma = \sigma_s + k\epsilon^{1/2} \Lambda^{1/2} \quad (\text{II.51})$$

$\dot{\epsilon}$ (s <sup>-1</sup> )	T (°C)	$\alpha$	M	$\Lambda$ (μm)	$f$	$\sigma_s$ (MPa)
10 <sup>-3</sup>	-20				0,96	72
5 10 <sup>-2</sup>	20	0,5	1,65	25	1,12	62
10 <sup>-3</sup>	20				1,20	52

**Tableau II.1** : Jeux de paramètres identifiés pour différentes valeurs de  $\dot{\epsilon}$  et  $T$  à partir des résultats de Keh et Weissmann pour le fer pur (cisaillement simple)

- Modèle de Teodosiu et Hu :

Il s'agit d'une approche très originale proposant d'intégrer les effets de l'activation thermique et de l'anisotropie de texture dans un modèle de plasticité macroscopique. Cette approche a été utilisée pour décrire l'effet de la vitesse de déformation et du changement de trajet sur la mise en forme des aciers IF (dans [UEN03]). L'équation de la surface de charge  $F$  fait intervenir un terme d'érouissage isotrope  $R$  et cinématique  $X$ , ainsi qu'une variable interne  $S$  liée à la structuration des dislocations au cours de la déformation :

$$F = \bar{\sigma}_e - Y_0 - R - f|S| \quad (\text{II.52})$$

La contrainte équivalente est définie par la relation :

$$\bar{\sigma}_e = \sqrt{\frac{3}{2}(s - X):M:(s - X)} \quad (\text{II.53})$$

Où  $M$  est un tenseur d'ordre 4 définissant l'anisotropie de la texture, qui est supposée ne pas évoluer au cours de la déformation.

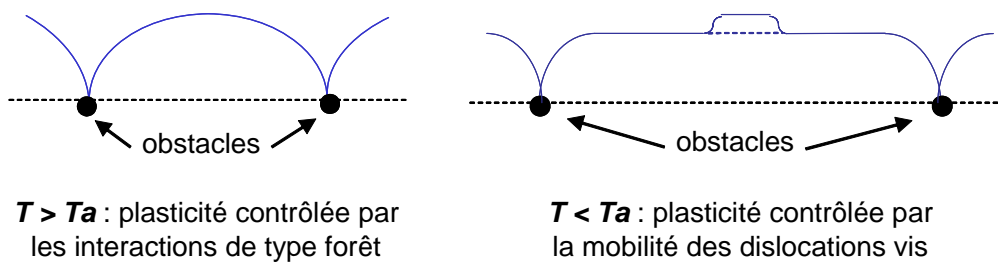
### II.B.3 Modélisation 'basse température' intégrant les densités de dislocations comme variables internes d'érouissage (Rauch [RAU93])

La relation (II.47), associant la contrainte d'écoulement à la racine carrée de la densité de dislocations est justifiée dans le cas des métaux de structure C.F.C., notamment du fait du mécanisme d'érouissage de type forêt. S'il est acquis que cette relation s'applique aux métaux C.C. à température ambiante, il a été montré [KEH63] qu'elle ne s'applique plus en dessous de la température de transition de comportement  $T_a$ .

Le modèle de Rauch propose une expression de la contrainte interne basée sur les mécanismes spécifiques au comportement des matériaux C.C. à basse température.

#### a) Calcul de la contrainte interne :

Le comportement plastique des métaux de structure C.C. pour  $T < T_a$  résulte du mouvement difficile des dislocations vis soumises à une forte friction de réseau. Celles-ci se déplacent grâce à la formation thermiquement activée de doubles décrochements. Si l'on considère une dislocation bloquée par des obstacles, celle-ci comporte une partie vis, sur laquelle l'avancée se fait par une succession de doubles décrochements, et une partie 'mixte' qui est en réalité constituée d'une accumulation de décrochements.



**Fig. II.7 :** Spécificités du comportement plastique à basse température dans les C.C.

La contrainte  $\tau$  requise pour plastifier le matériau doit permettre de générer des doubles décrochements via la contrainte effective  $\tau_{eff}$  et vaincre la contrainte interne  $\tau_i$  due aux arbres de la forêt :

$$\tau = \tau_{eff} + \tau_i \quad (\text{II.54})$$

L'expression de la contrainte interne peut s'obtenir par un bilan énergétique : sous l'effet de la contrainte effective  $\tau_{eff}$ , un double décrochement de longueur initiale  $l_c$  peut se propager à

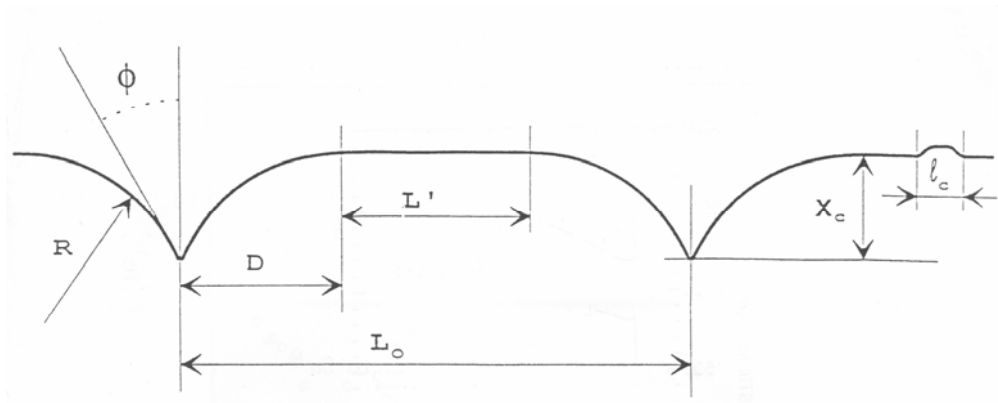
l'ensemble d'un segment vis de longueur  $L$  (figure II.7). La contrainte interne qui en résulte correspond à l'augmentation d'énergie stockée dans le matériau du fait de l'accroissement de longueur totale du brin  $dL$  lors de la propagation du segment vis.

$$dW_s = \tau_i d\gamma \quad (\text{II.55})$$

En considérant que l'énergie de ligne de la dislocation vaut  $\mu b^2$ , on en déduit une expression simple de la contrainte interne :

$$\tau_i = \frac{dW_s}{d\gamma} = \frac{\mu b^2 dL}{bdA} \quad (\text{II.56})$$

Où  $dA$  définit l'aire balayée lors de la propagation du double décrochement sur la longueur  $L$ .



**Fig. II.8 :** Ancrage d'une dislocation mobile sur les arbres de la forêt

Rauch a démontré, en raisonnant à partir de la figure II.8, que le terme  $\frac{dL}{dA}$  pouvait s'écrire :

$$\frac{dL}{dA} = \frac{\beta}{L_0} \quad (\text{II.57})$$

Où  $L_0$  correspond à la distance moyenne entre les points d'ancrage et  $\beta$  à un facteur de proportionnalité essentiellement lié à la résistance des obstacles :

$$\beta = \frac{2 \cos \phi}{1 + \sin \phi} \left( 1 + \frac{\tau_i}{\tau} \sin \phi \right) \quad (\text{II.58})$$

Il est intéressant de remarquer que, pour  $T > T_a$ , la contrainte effective est très faible, le rapport  $\tau_i / \tau$  tend vers 1, et par conséquent :

$$\beta \approx 2 \cos \phi \quad (\text{II.59})$$

Aux températures très basses, le rapport  $\tau_i / \tau$  est proche de 0, et les dislocations sont très peu courbées par les obstacles, d'où une valeur très faible de l'angle  $\phi$ . Il en résulte que :

$$\beta \approx \frac{2 \cos \phi}{1 + \sin \phi} \approx 2 \cos \phi \quad (\text{II.60})$$

On retrouve la même valeur de  $\beta$  dans ces deux cas extrêmes. Cette valeur se retrouve d'ailleurs aisément en schématisant le brin de dislocation mobile par un demi rectangle dont le côté de longueur  $L_0$  se déplace de  $dx$ , créant ainsi un accroissement du brin de  $2dx$  tout en balayant une aire  $2 L_0 dx$ . Cependant, cette valeur n'est pas valable pour les températures intermédiaires, et  $\beta$  est alors supposé dépendant de  $T$ .

Pour obtenir une dépendance entre  $\tau_i$  et la densité de dislocations  $\rho$ , il faut expliciter la distance entre obstacles  $L_0$ . D'après Louchet [LOU78], le brin de dislocation franchit l'obstacle dès qu'il a parcouru une distance critique  $x_c$  et l'aire balayée par la dislocation pour se défaire de l'obstacle correspond donc à l'aire associée à un obstacle :

$$L_0 x_c = \frac{1}{\rho} \quad (\text{II.61})$$

Ici,  $\rho$  désigne en principe la densité de dislocations forêt, mais celle-ci est confondue avec la densité totale de dislocations. La distance  $x_c$  peut être exprimée à partir de la figure II.7, si on considère que la partie mixte reliant le point d'ancrage à la dislocation vis forme un arc de cercle de rayon  $R = \mu b / \tau$ .  $R$  est relié à  $x_c$  et l'angle de courbure critique  $\phi$  que dessine le segment mixte lors du désancrage de l'obstacle :

$$x_c = R(1 - \sin \phi) \quad (\text{II.62})$$

Finalement, si les constantes  $\beta$ ,  $R$ ,  $\phi$  sont regroupées dans un même terme  $\alpha$ , on obtient la relation :

$$\tau_i = \frac{(\alpha \mu b)^2 \rho}{\tau} \quad \text{avec} \quad \alpha = \sqrt{\beta(1 - \sin \phi)} \quad (\text{II.63})$$

Il est important de noter que cette constante  $\alpha$ , essentiellement liée à la résistance des obstacles, dépend de la température, tout comme  $\beta$  et  $\phi$ . La contrainte appliquée se déduit aisément des équations (II.54) et (II.63) :

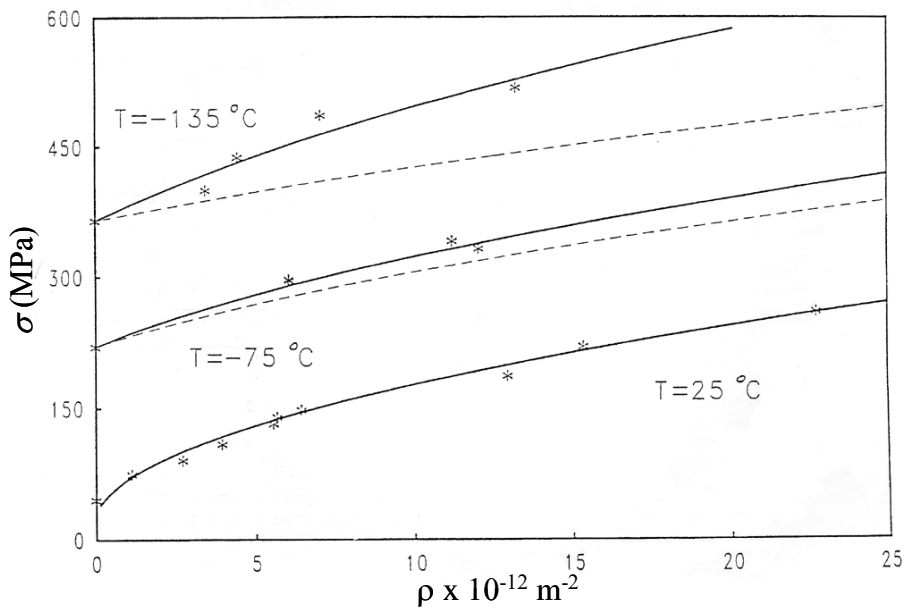
$$\tau = \frac{\tau_{eff}}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{\tau_{eff}^2 + 4(\alpha \mu b)^2 \rho} \quad (\text{II.64})$$

Rauch a comparé les données expérimentales de Keh & Weissmann avec les courbes théoriques de l'équation (II.61) : il est possible de trouver un jeu de paramètres pour lequel les résultats sont compatibles avec le modèle si l'on considère  $\alpha$  dépendant de  $T$  (tableau II.2).



$\dot{\epsilon}$ (s <sup>-1</sup> )	T (°C)	M	$\alpha$	$\tau_{eff}$ (MPa)
10 <sup>-3</sup>	-135	2	0,60	180
	-75		0,43	110
	25		0,38	15

**Tableau II.2 :** Jeu de valeurs de  $\alpha$  et  $\tau_{eff}$  identifiés à partir de l'équation (II.61) pour différentes valeurs  $T$ , à partir des résultats de Keh et Weissmann [KEH63] pour le fer  $\alpha$  (cisaillement simple)



**Fig. II.9 :** Identification du modèle d'érouissage de Raouf sur les résultats expérimentaux avec  $\alpha$  constant (traits pointillés) ou  $\alpha$  fonction de  $T$  (symboles \*)

**b) Transition hautes / basses températures :**

L'équation (II.61) permet de discerner deux cas extrêmes :

- aux températures élevées ( $T > T_a$ ), l'activation thermique joue un rôle moins important et un développement limité de l'expression (II.61) en  $\tau_{eff} / \tau$  au premier ordre conduit à :

$$\tau = \tau_{eff} + \alpha \mu b \sqrt{\rho} \quad \text{lorsque } \tau_{eff} / \tau \ll 1 \quad (\text{II.65})$$

- aux faibles températures ( $T \ll T_a$ ), l'activation thermique devient prépondérante et un développement de l'expression (II.60) en  $\tau_i / \tau$  au premier ordre donne :

$$\tau = \tau_{eff} + \frac{(\alpha \mu b)^2 \rho}{\tau_{eff}} \quad \text{lorsque } \tau_i / \tau \ll 1 \quad (\text{II.66})$$

Ce modèle prédit donc une dépendance linéaire de la contrainte appliquée en fonction de la racine carrée de la densité de dislocations à température ambiante. Cependant, on tend à obtenir une dépendance linéaire pour de très basses températures.

Par construction, la transition entre les comportements ‘basse’ et ‘haute’ températures est intégrée dans le modèle d’écrouissage proposé, celui-ci étant basé sur des considérations énergétiques valables pour n’importe quelle température. Il suffit de prendre  $\tau_{eff}$  nul dans l’équation (II.61) pour retrouver l’expression communément admise de la contrainte pour les matériaux C.F.C. et pour obtenir une valeur de  $\alpha$  conforme à celle obtenue en considérant un écrouissage de type forêt.

Rauch a identifié l’évolution du paramètre  $\alpha$  sur les résultats expérimentaux en traction de Keh et Weissman (Tableau II.2 et figure II.8) et il a montré que la loi de comportement proposée ici est à même de décrire la transition de comportement plastique à condition de prendre le coefficient  $\alpha$  dépendant de  $T$ . L’augmentation de  $\alpha$  avec  $T$  prédite par le modèle est très marquée.

Par ailleurs, des essais d’écrouissage latent réalisés sur des monocristaux de fer par Nakada & Keh [NAK66] montrent une évolution de  $\alpha$  avec  $T$  encore plus forte que celle suggérée par le modèle d’écrouissage de Rauch. On peut invoquer la spécificité des essais d’écrouissage latent par rapport au glissement multiple induit par la déformation des polycristaux. Une autre explication peut provenir du fait de la répartition plus homogène des dislocations à basse température (les parois et cellules tendent à disparaître), d’où une meilleure ‘efficacité’ des arbres de la forêt, ce qui correspond à une augmentation de  $\alpha$  dans la loi d’écrouissage.

Avec la loi d’écrouissage formulée par Rauch, il ne peut y avoir une de transition progressive du comportement sous l’effet de la déformation en cours d’essai à  $\dot{\epsilon}$  et  $T$  fixés. Cette transition, observée par Louchet [LOU79] lors d’essais mécaniques menés sur des lames minces, doit se produire lorsque la longueur de segment vis devient strictement nulle (on se retrouve alors dans une configuration de type C.F.C.), ce qui signifie que le rapport  $L / L_0$  décroît pour devenir strictement égal à 1. Or en raisonnant à partir de la figure II.7, on peut montrer que :

$$\frac{L_0}{L} = \frac{L_0}{2R \cos \phi} = \frac{\beta}{2 \cos \phi} \frac{\tau_i}{\tau} \quad (\text{II.67})$$

Or en cours d’essai, la contrainte effective, qui est surtout fonction que de  $\dot{\epsilon}$  et  $T$ , varie peu et reste strictement inférieure à  $\tau$  : le brin conserve une partie rectiligne non négligeable. La transition entre le comportement typique des C.C. et celui à température ambiante ne peut donc s’effectuer qu’en modifiant la vitesse de sollicitation ou la température.

### c) Effet des éléments d’alliage :

Toutes les équations de ce modèle s’appliquent aux métaux purs pour lesquels la limite d’élasticité dépend de la friction de réseau. L’ajout d’éléments d’alliage peut augmenter la friction de réseau et modifier la résistance des obstacles (arbres de la forêt) : il tend à réduire à la fois la mobilité des segments vis et mixtes. Ce surcroît de contrainte dû aux éléments d’alliage peut dépendre du caractère de la dislocation : on distingue  $\tau_0^v$  et  $\tau_0^m$ , qui désignent

respectivement l'effet des éléments d'alliage sur les segments vis et mixtes. L'équation (II.60) devient alors :

$$\tau_i = \tau - (\tau_{eff} + \tau_0^v) = \frac{(\alpha\mu b)^2 \rho}{\tau - \tau_0^m} \quad (II.68)$$

Selon Rauch, le taux d'écrouissage étant généralement plus faible que dans un métal pur,  $\tau_0^v$  est supérieur à  $\tau_0^m$ . Cet effet sélectif des éléments d'alliage permet d'affiner la description du modèle, mais elle présente l'inconvénient d'ajouter deux paramètres supplémentaires. Dans le cadre d'une modélisation simplifiée, Rauch se propose de ne considérer qu'un seul terme de friction  $\tau_0$ , ce qui conduit à remplacer  $\tau$  par  $\tau - \tau_0$  dans les équations (II.60) et (II.61) :

$$\tau = \tau_0 + \frac{\tau_{eff}}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{\tau_{eff}^2 + 4(\alpha\mu b)^2 \rho} \quad (II.69)$$

#### d) Application au cas du polycristal :

La loi de comportement obtenue pour un matériau polycristallin se déduit de l'équation (II.66) en multipliant les termes par le facteur de Taylor moyen  $M$  :

$$\sigma = \sigma_0 + \frac{\sigma_{eff}}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{\sigma_{eff}^2 + 4(\alpha\mu b M)^2 \rho} \quad (II.70)$$

Cette expression est à comparer avec la formulation simple de la loi d'écrouissage dérivée des modèles utilisés pour les matériaux de structure C.C..

Afin d'intégrer la loi d'écrouissage, Rauch utilise la relation (II.67) couplée à la loi d'évolution de  $\rho$  déjà introduite dans sa description phénoménologique de l'écrouissage (équation II.47) :

$$\frac{d\rho}{d\gamma} = \frac{1}{b\Lambda} - f(\dot{\epsilon}, T)\rho \quad (II.71)$$

Les paramètres  $\sigma_0$ ,  $\sigma_{eff}$  et  $f$  ont été identifiés à partir des résultats expérimentaux déjà utilisés pour caler le modèle phénoménologique.  $\sigma_0$  est une constante matériau tandis que  $\sigma_{eff}$  et  $f$  peuvent dépendre de  $T$ . Le libre parcours moyen  $\Lambda$  reste fixé à 25  $\mu\text{m}$  tandis que  $\alpha$  est toujours pris égal à 0,5 (tableau II.3). Les valeurs obtenues par identification pour  $\sigma_{eff}$  et  $f$  demeurent comparables à celles du tableau II.2.

Une identification a également été proposée pour un acier doux à partir des résultats expérimentaux de Johnson [JOH90] en gardant  $\Lambda$  et  $\alpha$  respectivement égaux à 25  $\mu\text{m}$  et 0,5. (Tableau II.4). Si  $\sigma_0$  et  $\sigma_{eff}$  sont plus élevées que pour le fer pur, la valeur de  $f$  reste sensiblement la même.

$\dot{\epsilon}$ (s <sup>-1</sup> )	T (°C)	$\alpha$	$M$	$\Lambda$ (μm)	$\sigma_0$ (MPa)	$\sigma_{eff}$ (MPa)	$f(\dot{\epsilon}, T)$
10 <sup>-3</sup>	-20					55	0,88
5 10 <sup>-2</sup>	20	0,5	1,65	25	38	40	1,08
10 <sup>-3</sup>	20					25	1,24

**Tableau II.3 :** Jeux de paramètres identifiés pour différentes valeurs de  $\dot{\epsilon}$  et  $T$  à partir d'essais de cisaillement simple pour le fer pur [RAU93]

$\dot{\epsilon}$ (s <sup>-1</sup> )	T (°C)	$\alpha$	$M$	$\Lambda$ (μm)	$\sigma_0$ (MPa)	$\sigma_{eff}$ (MPa)	$f(\dot{\epsilon}, T)$
5 10 <sup>-2</sup>	-72					245	0,96
5 10 <sup>-2</sup>	20	0,5	1,65	25	110	80	1,20
10 <sup>-4</sup>	20					5	1,44

**Tableau II.4 :** Jeux de paramètres identifiés pour différentes valeurs de  $\dot{\epsilon}$  et  $T$  à partir d'essais de traction simple sur un acier doux [JOH90]

L'intérêt majeur de la loi d'érouissage proposée ici réside dans la possibilité d'étendre l'identification à un large domaine de températures.

#### II.B.4 Approche probabiliste de l'érouissage 'basse température' : modèle de Stainier, Cuitiño, Ortiz [STA02]

Ce modèle propose de prendre en compte tout un ensemble de mécanismes caractéristiques du comportement des matériaux de structure C.C. pour  $T < T_a$  :

- mécanisme d'avancée des segments vis par doubles décrochements ;
- prise en compte de l'érouissage de type forêt ;
- influence d'autres mécanismes tels que le glissement dévié sur la production et l'annihilation des dislocations.

Cette description est basée sur le principe suivant : sur un système de glissement ( $s$ ), la cission critique  $\tau_c^s$  est définie comme étant la somme de la contribution de la contrainte effective résultant de l'activation thermique d'une part et de l'érouissage 'forêt' d'autre part. Tous ces mécanismes sont intégrés en utilisant une approche probabiliste, de sorte que cette décomposition de  $\tau_c^s$  n'apparaît jamais explicitement dans les équations du modèle.

Ce modèle, détaillé dans l'**annexe A.1**, est très différent de tous ceux décrits jusqu'ici car il fait appel à des notions probabilistes pour prédire le mouvement de percolation des dislocations à travers une forêt d'obstacles. Dans un souci de clarté, nous avons choisi de conserver les notations introduites par les auteurs tout en indiquant leur correspondance avec celles déjà utilisées dans d'autres modèles.

La démarche des auteurs consiste dans un premier temps à exprimer la contrainte effective en se fondant sur le mécanisme de mobilité des dislocations vis par double décrochement, déjà décrit dans le paragraphe II.B.2.

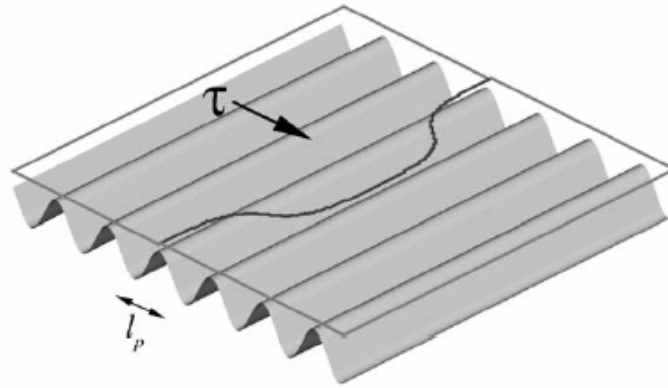
Pour un segment vis soumis à une cisssion effective  $\tau_{eff}$ , l'enthalpie  $\Delta G$  de formation d'un double décrochement (illustrée sur la figure II.9) vaut respectivement :

$$\Delta G^+ \approx E^{kink} - \tau_{eff} b L^{kink} l_p \quad (\text{nucléation dans le sens de } \tau^s) \quad (\text{II.72})$$

$$\Delta G^- \approx E^{kink} + \tau_{eff} b L^{kink} l_p \quad (\text{nucléation dans le sens opposé}) \quad (\text{II.73})$$

Avec :

- $E^{kink}$  : hauteur de la barrière énergétique (correspond à  $\Delta G_0$ )
- $L^{kink}$  : longueur caractéristique du double décrochement (correspond à  $l_c$ )
- $l_p$  : distance séparant deux vallées de Peirls (du même ordre que  $b$ )



**Fig. II.10** : Principe du mécanisme de double décrochement [STA03]

En notant  $\tau_p$  la contrainte pour laquelle la nucléation spontanée d'un double décrochement, on obtient une expression de la forme :

$$\Delta G^\pm \approx E^{kink} \left( 1 \mp \frac{\tau_{eff}}{\tau_p} \right) \quad \text{avec} \quad \tau_p = \frac{E^{kink}}{b L^{kink} l_p} \quad (\text{II.74})$$

Par la relation d'Orowan, on en déduit la vitesse moyenne de glissement sur le système ( $s$ ) :

$$\dot{\gamma} = \dot{\gamma}_0^{kink} \exp\left[-\frac{E^{kink}}{k T}\right] \sinh\left[\frac{E^{kink}}{k T} \frac{\tau_{eff}}{\tau_p}\right] \quad \text{avec} \quad \dot{\gamma}_0^{kink} = 2 b \rho^s l_p v_D \quad (\text{II.75})$$

On obtient finalement l'expression de la contrainte effective nécessaire au franchissement des barrières énergétiques que constituent les vallées de Peirls :

$$\frac{\tau_{eff}}{\tau_p} = \frac{k T}{E^{kink}} \operatorname{arcsinh}\left[\frac{\dot{\gamma}^{kink}}{\dot{\gamma}_0^{kink}} \exp\left(\frac{E^{kink}}{k T}\right)\right] \quad (\text{II.76})$$

Les auteurs se fondent sur un mécanisme élémentaire de franchissement des obstacles (figure II.10) pour établir une expression de la contrainte d'écoulement  $\tau^s$  sur le système ( $s$ ).

Ils considèrent un segment de dislocation ancré sur 2 arbres de la forêt, comportant une partie vis de longueur  $l_s$  et une partie coin de longueur  $l_e$ . Sous l'effet d'une cisssion appliquée  $\tau$ , la dislocation avance d'une distance  $da_s$  pour la partie vis et  $da_e$  pour la partie coin. L'énergie fournie pour franchir l'obstacle doit alors excéder le surcroît d'énergie relatif au franchissement des vallées de Peierls et à l'allongement du brin de dislocation :

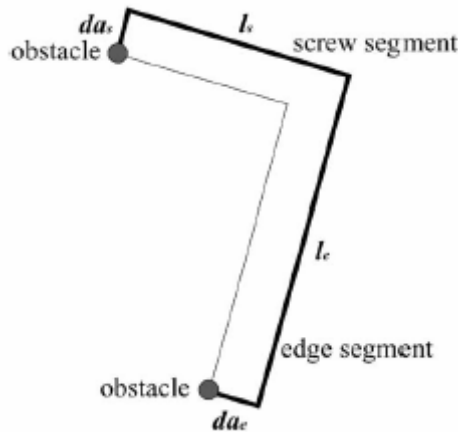
$$\tau b l_e da_e + \tau b l_s da_s \geq \tau_{eff}^{edge} b l_e da_e + \tau_{eff}^{screw} b l_s da_s + 2U_{edge} da_s + 2U_{screw} da_e \quad (II.77)$$

$\tau_{eff}^{edge}$  et  $\tau_{eff}^{screw}$  désignent les contraintes effectives liées au franchissement des vallées de Peierls pour les segments coin et vis respectivement. De manière analogue,  $U_{edge}$  et  $U_{screw}$  définissent les énergies de ligne pour les deux configurations. La spécificité du glissement dans les métaux de structure C.C. conduit à négliger les termes  $\tau_p^{edge}$  et  $U_{screw}$  devant  $\tau_p^{screw}$  et  $U_{edge}$ . L'équation (II.78) se simplifie sous la forme :

$$\tau^s \geq \tau = \tau_{eff}^{screw} + \frac{2U^{edge}}{b l_s} \quad (II.78)$$

La contrainte d'écoulement  $\tau^s$  se décompose en deux contributions, un terme de contrainte effective lié au mécanisme de double décrochement, et un terme d'écroissage qui dépend de la longueur de segment vis. Le terme d'écroissage dépend à la fois de l'activation thermique et de la densité d'obstacles (de dislocations ici).

A partir de l'équation (II.78), on montre dans l'**annexe A.2** que l'on peut retrouver la loi d'écroissage proposée dans le modèle de Rauch [RAU93], alors que les deux modèles font appel à des considérations distinctes.



**Fig. II.11** : Mécanisme élémentaire de franchissement d'un obstacle par une dislocation

Dans ce modèle, l'écroissage est décrit par une approche statistique. Les auteurs introduisent une variable aléatoire  $\tau$ , qui correspond à la cisssion nécessaire pour qu'une dislocation franchisse un obstacle de type forêt. Cette approche probabiliste de la loi d'écroissage est détaillée en **annexe A.1**.

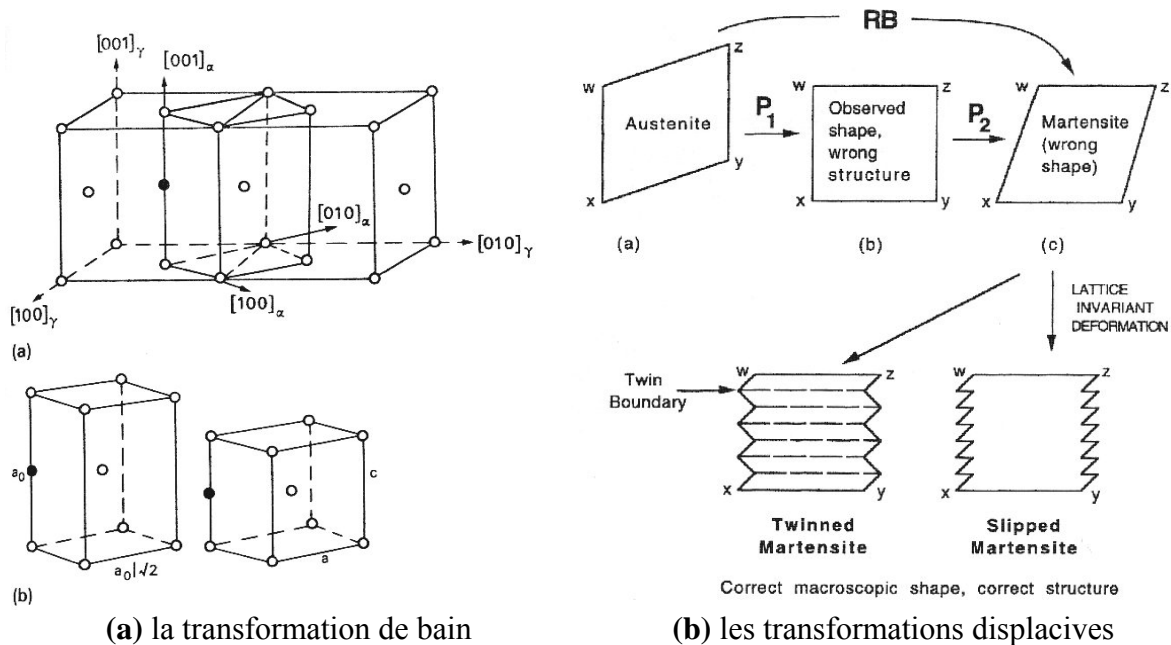
Rappels bibliographiques concernant la microstructure des aciers faiblement alliés

### II.B.5 Les transformations displacives

Les structures bainitique et martensitique s'obtiennent par refroidissement à partir de la phase parente austénitique ( $\gamma$ ), l'effet de la vitesse de trempe étant de modifier la diffusion du carbone et donc la microstructure. La transformation de l'austénite en martensite ou en bainite est de nature displacive, par opposition avec les transformations reconstructives.

Plus généralement, au cours de la trempe, la transformation de phase peut mettre en jeu deux mécanismes :

- Une rupture des liaisons atomiques conduisant à un réarrangement de la microstructure. Ce mécanisme n'intervient que pour des vitesses de refroidissement faibles permettant la diffusion des atomes. On parle alors de transformation reconstructive.
- Une déformation homogène de la maille cristalline lorsque la vitesse de refroidissement ne laisse pas le temps aux atomes de diffuser. C'est ce dernier mécanisme qui correspond à la transformation displacive.



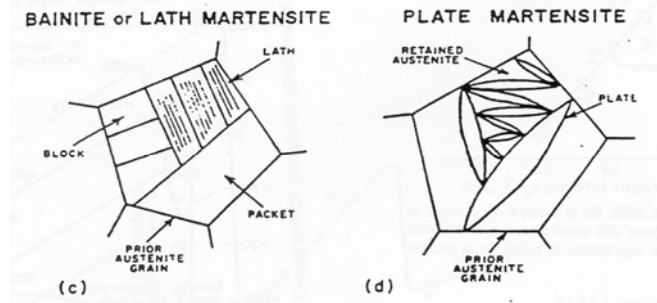
**Fig. II.12 :** Illustration des mécanismes de transformation ( $\gamma \rightarrow \alpha'$ ) (d'après Badeshia [BHA92])

Ce sont ces mécanismes qui, combinés à ceux de diffusion du carbone, gouvernent la formation des microstructures dans les aciers faiblement alliés.

La transformation displacive permettant de passer de la phase austénitique notée ( $\gamma$ ) à la phase martensitique ou bainitique notée ( $\alpha'$ ) correspond, d'un point de vue géométrique, à un cisaillement du réseau cristallin, illustré par la transformation  $P_1$  sur la figure II.12.b.

Cependant, si cette transformation permet effectivement d'obtenir la forme géométrique de la phase ( $\alpha'$ ), elle ne coïncide pas avec la relation permettant d'obtenir la maille de structure cubique centrée (C.C.) à partir de celle de la phase mère (C.F.C.). Cette transformation, proposée par Bain, permet d'extraire la cellule de martensite de celle de l'austénite en faisant subir au produit intermédiaire (figure II.12.a) une compression de 20 % suivant la direction [100] et une expansion de 12% selon [010] et [001]. Comme cette dernière transformation ne

donne ni les directions ni les plans invariants, Badeshia a proposé d'ajouter à celle-ci une rotation de corps rigide n'affectant pas les propriétés de la maille cristalline. Il s'agit de la transformation  $R.B = P_2.P_1$  illustrée sur la figure II.11.b. Finalement, l'obtention de la 'bonne' forme géométrique, correspondant à la transformation displacive, peut être assurée par l'intermédiaire de deux mécanismes n'affectant pas l'orientation du réseau cristallin : le glissement plastique et le maclage (ce dernier mécanisme n'étant observé que dans la martensite).

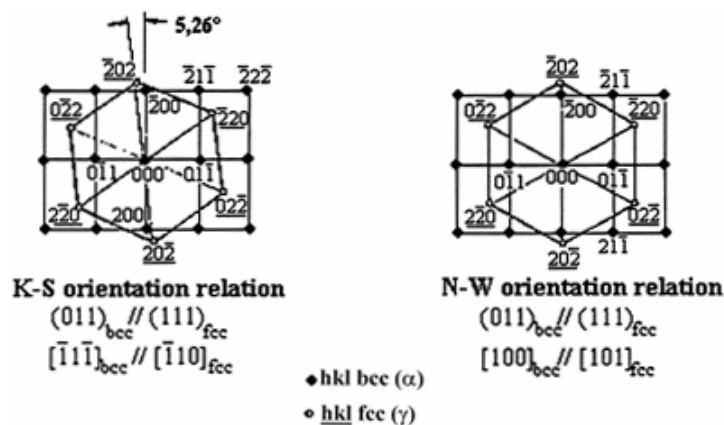


**Fig. II.13 :** Obtention d'une structure lamellaire (c) ou aiguillée (d) lors de la transformation  $(\gamma) \rightarrow (\alpha')$

La transformation  $(\gamma) \rightarrow (\alpha')$  nécessite l'apparition de germes puis leur croissance dans la matrice. Il existe une barrière énergétique liée à l'énergie de création d'interfaces  $\gamma/\alpha$  ainsi qu'à l'énergie de déformation (glissement ou maclage) relative aux transformations displacives. La transformation de phase s'amorce lorsque la force motrice de transformation excède la barrière d'énergie, ce qui se produit lorsque le différentiel de température par rapport à la température de transformation  $A_{r3}$  du diagramme d'équilibre dépasse une certaine valeur. La vitesse de la transformation  $(\gamma) \rightarrow (\alpha')$  est telle que les interfaces  $(\gamma) / (\alpha')$  sont de nature cohérente ou semi cohérente, avec la présence entre les deux phases de relations de macles ou des dislocations de transformation (dont le vecteur de Burgers est commun aux deux phases).

Cela explique la présence de relations d'orientations de type Kurdjumov & Sachs (K-S) ou Nishiyama & Wasserman (N-W) entre les phases 'mère' et 'fille'.

Ces relations sont généralement bien vérifiées, que ce soit pour la bainite ou la martensite. D'une part, la relation K-S signifie que l'un des plans 4 denses  $\{111\}$  de l'austénite est confondu avec un des 6 plans denses  $\{110\}$  de la phase  $(\alpha')$ . D'autre part, l'une des 6 directions denses  $\langle 110 \rangle$  de l'austénite coïncide avec l'une des 4 directions denses  $\langle 111 \rangle$  de la phase  $(\alpha')$ .



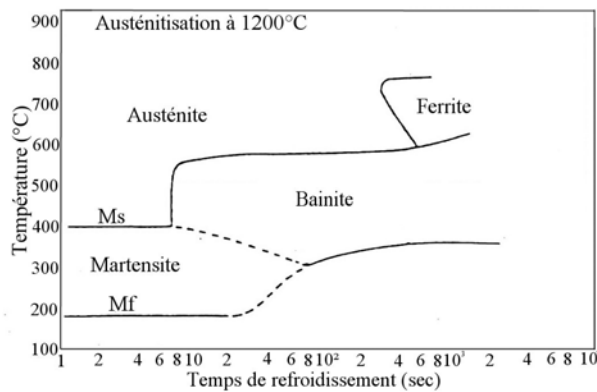
**Fig. II.14 :** Relations d'orientation K-S et N-W entre les phases  $(\gamma)$  et  $(\alpha')$



Cette relation implique l'existence de 24 variants d'orientation possibles pour la phase ( $\alpha'$ ) à partir d'une seule orientation de la phase mère. La relation N-W, quant à elle, ne garde que la concordance des plans denses entre les deux phases, ce qui conduit à 48 variants d'orientation possibles.

### II.B.6 La martensite

Si la température de transformation ( $\gamma \rightarrow \alpha'$ ) est inférieure à une valeur critique  $M_s$ , alors les transformations sont uniquement de nature displacive et la diffusion d'atomes n'entre pas en jeu. Les germes apparaissent de préférence aux interfaces de faible énergie et croissent sous forme d'aiguilles, de fines plaquettes ou de lattes. La transformation martensitique induit une déformation du cristal. Différents variants apparaissent au fur et à mesure parmi les 24 possibilités d'accommodation de cette déformation. Tous ces variants obéissent en général à une relation de type K – S.

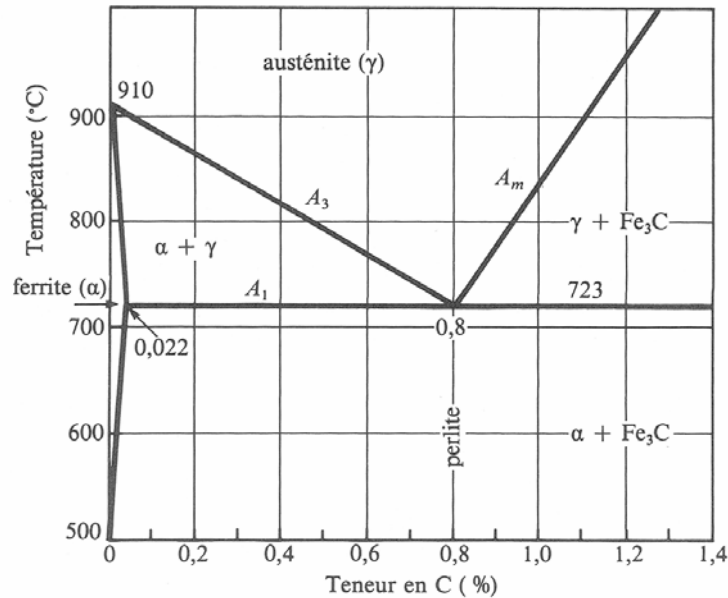


**Fig. II.15 :** Diagramme TTT d'un acier Cu Ni Cr Mo V

Une des spécificités de la transformation martensitique réside dans la présence de carbone en sursaturation dans la phase ( $\alpha'$ ) et ce en raison de l'importance moindre des mécanismes de diffusion. Par conséquent, la transformation de Bain décrite précédemment impose toujours la même tétragonalité de la maille, ce qui tend à favoriser l'existence de directions et de plans invariants entre les phases ( $\gamma$ ) et ( $\alpha'$ ). Cela contribue à accentuer les déformations liées à la transformation. Ces déformations influent notablement sur les propriétés microstructurales de la martensite. Il existe deux mécanismes d'accommodation, chacun associé à une forme de martensite :

- Le glissement qui conduit à une martensite avec une forte densité de dislocations (de l'ordre de  $10^{12} \text{ m}^{-2}$ ). C'est la martensite dite en lattes.
- Le maclage qui conduit à une martensite maclée ou micro maclée. Ce phénomène apparaît lorsque la teneur d'éléments en solution augmente, limitant ainsi la possibilité d'accommodation par glissement. Elle présente en général de moins bonnes propriétés de ténacité que la martensite en lattes.

La température de transformation martensitique est de l'ordre de  $A_3 - 300^\circ\text{C}$  (figure II.16). La croissance se fait généralement sous forme d'aiguilles, de plaquettes ou de lattes, ce qui permet de réduire les contraintes internes liées à l'accommodation des déformations inhérentes à la transformation. Le carbone étant en sursaturation à l'intérieur des lattes, les carbures sont présents sous la forme de fins précipités, aussi bien présents dans les lattes qu'aux interfaces.



**Fig. II.16 :** Diagramme d'équilibre Fe / C

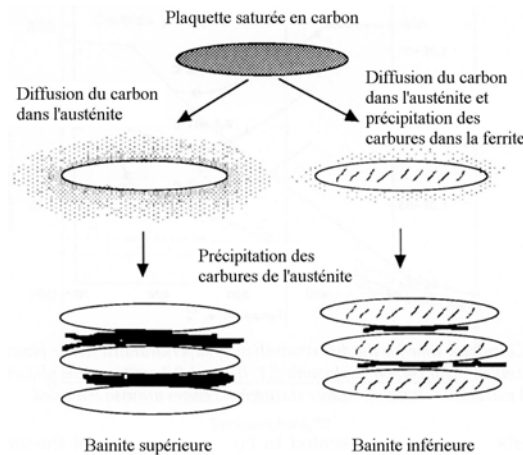
Une dernière caractéristique majeure de la transformation martensitique réside dans la difficulté d'accommoder les déformations liées à la variation de volume et à la transformation de phase au cours de la trempe. Ceci peut contribuer à générer des microfissures à l'interface  $(\gamma)/(\alpha')$  lors du refroidissement. Cette fissuration est d'autant plus favorisée que la vitesse de trempe est élevée. Lors du traitement, il faut donc trouver un compromis : la trempe doit être assez rapide pour obtenir une microstructure purement martensitique mais pas trop sévère de manière à éviter tout risque de microfissuration.

### II.B.7 La bainite

Lorsque la température de transformation du matériau est suffisamment élevée pour permettre la diffusion des atomes de carbone, on obtient une microstructure bainitique constituée de fins agrégats de plaquettes (ou lattes) de ferrite bainitique et de particules de cémentite. Là encore, la transformation de phase est de nature displacive et s'accompagne d'une déformation d'accommodation identique à celle décrite concernant la transformation martensitique.

La présence de plusieurs agrégats de lattes au sein d'un ex-grain  $(\gamma)$  s'explique par la déformation plastique de l'austénite au cours de la croissance des germes : la consolidation de l'austénite environnant les plaquettes tend à arrêter la croissance de ces dernières, si bien que chaque paquet de lattes n'occupe qu'une fraction de l'ex grain  $(\gamma)$ . Si l'on joue sur la température de transformation, c'est à dire sur les mécanismes de diffusion, il est possible d'obtenir trois formes de bainite :

- **La bainite supérieure** : Cette microstructure est constituée de fines plaquettes ou lattes de ferrite parallèles les unes aux autres et de même orientation cristallographique. Un ex-grain austénitique est en général constitué de quelques paquets de lattes de 10 à 15  $\mu\text{m}$  de long, de 0,2  $\mu\text{m}$  d'épaisseur environ et faiblement désorientés les uns par rapport aux autres. La germination des plaquettes a lieu essentiellement aux ex-joints austénitiques, ces derniers étant de nature incohérente. Le carbone contenu dans les lattes de ferrite bainitique diffuse vers la phase austénitique et les particules de cémentite se forment presque exclusivement entre les lattes. En revanche, les lattes ne contiennent pas de carbures.
- **La bainite inférieure** : les caractéristiques de cette microstructure sont assez analogues à celles de la bainite supérieure. Toutefois, cette microstructure s'obtient pour des températures de transformation plus faibles et, lors de la germination des plaquettes de ferrite bainitique, le carbone présent en saturation ne diffuse que partiellement vers l'austénite résiduelle. Les carbures précipitent à la fois entre les lattes et à l'intérieur de celles-ci. Ces derniers précipités sont plus fins que ceux observés dans la bainite supérieure car la phase austénitique résiduelle est moins saturée en carbone.



**Fig. II.17** : Différences microstructurales entre bainite supérieure et inférieure

- **La bainite granulaire** : ce terme désigne la bainite obtenue lors d'un refroidissement lent et continu (et non par traitement isotherme). Contrairement à ses deux autres formes, la bainite granulaire ne contient pas de carbure, car le carbone diffuse progressivement vers l'austénite au cours de la transformation. On observe des lattes épaisses organisées en paquets ainsi que des domaines constitués d'austénite résiduelle stabilisée par le carbone.

### II.B.8 Diffusion du carbone et formation des précipités

Au cours de la transformation  $(\gamma) \rightarrow (\alpha')$ , la solubilité du carbone est beaucoup plus faible dans la martensite (ou la ferrite bainitique) que dans l'austénite : celui-ci tend à précipiter sous forme de cémentite  $\text{Fe}_3\text{C}$  de structure orthorhombique. Les mécanismes de diffusion du carbone étant très liés au traitement thermique à l'origine de la microstructure recherchée, la structure et la répartition de ces précipités peuvent être très variables.

Dans la bainite, le carbone présent en sursaturation dans les lattes, diffuse vers la phase  $(\gamma)$  résiduelle et précipite presque exclusivement à l'interface entre les lattes. La taille des

précipités est fonction de la vitesse de refroidissement et de la teneur en carbone. Les carbures ainsi formés respectent une relation d'orientation dite 'relation de Pitsch' entre la cémentite et l'austénite :

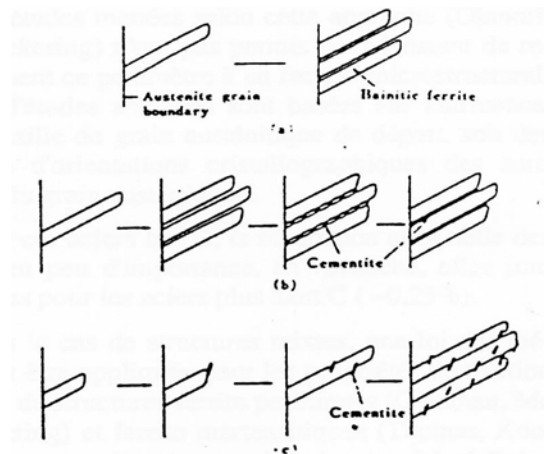
- $[100]_{Fe_3C} // [5\bar{5}4]_y$
- $[010]_{Fe_3C} // [\bar{1}\bar{1}0]_y$
- $[001]_{Fe_3C} // [\bar{2}25]_y$

Les 48 variants de la ferrite bainitique (24 pour la martensite), conduisent à un grand nombre de relations d'orientation possibles entre la cémentite et la ferrite bainitique.

Dans la bainite inférieure, le traitement de trempe empêche la précipitation dans l'austénite du carbone contenu en excès dans les lattes. En conséquence, un mode de précipitation 'secondaire' est mis en jeu : des carbures germent à l'intérieur des lattes en adoptant des relations d'orientation dites de Bagaryatski :

- $[100]_{Fe_3C} // [111]_{\alpha'}$
- $[010]_{Fe_3C} // [\bar{1}21]_{\alpha'}$
- $[001]_{Fe_3C} // [\bar{1}01]_{\alpha'}$

De plus, ces particules de cémentite secondaires précipitent souvent en constituant des réseaux parallèles, à environ 60° de l'axe de la plaquette de bainite (figure II.18). Ce mode de précipitation particulier à la bainite inférieure, pourrait être attribué au fait que les précipités germent à l'interface ferrite/austénite, adoptant de ce fait une orientation qui satisfait au mieux les relations avec la ferrite et l'austénite.



**Fig. II.18 :** Illustration des différents modes de précipitation dans la bainite

Dans la martensite, les précipités de cémentite sont à la fois présents entre les lattes de martensite et à l'intérieur de celles-ci. Les phénomènes de diffusion étant très limités, les carbures sont encore plus fins que dans la bainite supérieure.

## Conclusion du chapitre II

### Etude bibliographique des mécanismes de plasticité dans les métaux de structure C.C. :

*Dans la ferrite, le comportement plastique se traduit par une transition entre un régime 'haute température' analogue à celui décrit dans les métaux de structure C.F.C., et un régime 'basse température', pour lequel la mobilité des dislocations vis est réduite [HIR60]. La température de transition  $T_a$  entre ces deux régimes est de l'ordre de la température ambiante. On peut faire une synthèse des principaux éléments à prendre en compte dans la modélisation du comportement :*

- Systemes à considérer : le glissement est activé sur les plans  $\{110\}$  et  $\{112\}$ . Les directions de glissement sont les directions  $\langle 111 \rangle$  [FRA83]. Pour  $T < T_a$ , on observe un durcissement des systèmes  $\langle 111 \rangle \{112\}$  par rapport aux systèmes  $\langle 111 \rangle \{110\}$ .
- Loi d'écoulement : pour  $T < T_a$ , l'écoulement viscoplastique est commandé par le mécanisme de double décrochement [LOU78]. Il s'agit d'un mécanisme activé thermiquement. Dans ce régime, d'autres mécanismes activés thermiquement, comme le glissement dévié, peuvent être mis en jeu [ESS79].
- Loi d'écrouissage : le mécanisme élémentaire de franchissement d'un obstacle par une dislocation est affecté par la température [LOU78]. Il existe plusieurs approches de l'écrouissage microscopique dans les métaux de structure C.C. (modèles phénoménologiques, 'physiques'). Le modèle de Rauch [RAU93] décrit une transition continue du régime 'basse' et 'haute' température. Il présente un compromis intéressant entre la description des mécanismes physiques et le nombre de paramètres mis en jeu. D'autres approches proposent une description plus détaillée des mécanismes d'écrouissage, mais elles sont trop lourdes à mettre en œuvre dans le cadre d'une approche polycristalline [STA02].
- Loi d'évolution des densités de dislocations : les mécanismes de production et d'annihilation des dislocations sont peu décrits dans les métaux de structure C.C. à basse température.

### Rappels bibliographiques sur la microstructure des aciers faiblement alliés :

*La transformation martensitique est de nature displacive et conduit à la formation d'une phase tétragonale. Les déformations de transformation engendrent une microstructure en lattes ou en aiguilles. En jouant sur la température de trempe, on peut obtenir une microstructure martensitique ou bainitique. Il existe de nombreuses différences microstructurales entre bainite et martensite :*

- Les mécanismes de diffusion du carbone : ils influent grandement sur la répartition du carbone dans la microstructure. Dans la bainite, on considère que tout le carbone précipite sous forme de carbures (ferrite bainitique). Dans la martensite, une partie du carbone reste en sursaturation. Les carbures y sont plus fins et plus dispersés.

- Variants d'orientation : du fait des relations d'orientation entre la phase mère austénitique et la ferrite bainitique ou la martensite, un grain austénitique engendre un nombre fini de variants d'orientation (24 pour la martensite, 12 pour la ferrite bainitique).
- Morphologie : la morphologie est très sensible à la vitesse de refroidissement. On distingue plusieurs types de microstructures martensitique (martensite en lattes ou en aiguilles) ou bainitique (bainite inférieure, bainite supérieure, bainite granulaire).

Dans le cas de l'acier de cuve, Sekfali [SEK04] et Mathieu [MAT06] ont proposé une description simplifiée de ces microstructures : la bainite et la martensite sont assimilées à des 'composites' constitués d'une matrice ferritique et de carbures. Cela revient à négliger la présence de carbone en sursaturation dans la matrice ainsi que la tétragonalité de la maille.

## Références bibliographiques

- [ARI99] ARIZMENDI (D.) – *Simulation par la méthode des éléments finis de la déformation plastique des cristaux à structure cubique centrée en utilisant un modèle basé sur les mécanismes physiques de la plasticité cristalline*. Thèse de Doctorat, Université Paris 13, 1999.
- [BAR37] BARRETT (C.S.), ANSEL (G.) et MEHL (R.F.) – *Slip, twinning and cleavage in iron and silicon ferrite*. Trans. A.S.M., pp. 702-736, 1937.
- [BHA92] BHADSHIA H.K.D.H. – *Bainite in steels*. London, 1992.
- [BHA01] BHATTACHARYYA (A.), EL-DANAF (E.), KALIDINDI (S.), DOHERTY (R.) – *Evolution of grain scale microstructure during large strain simple compression of polycrystalline aluminium with quasi columnar grains: OIM measurements and numerical simulations*. International Journal of Plasticity, vol. 17, n°4, pp. 537-563, 2001.
- [BER04] BERBENNI (S.), FAVIER (V.), LEMOINE (X.), BERVEILLER (M.)- *A micromechanical approach to model the bake hardening effect for low carbon steels*. Scripta Materialia, vol. n°51, pp. 303-308, 2004.
- [CAI87] CAILLETAUD (G.) – *Une approche micromécanique phénoménologique du comportement inélastique des métaux*. Thèse de Doctorat, Université Paris 6, 1987.
- [DAN01] DANIELOU (A.) – *Etude métallurgique du comportement en fatigue d'aciers sans interstitiels au voisinage de la température ambiante*. Thèse de Doctorat, Ecole Centrale Paris, 2001.
- [DEL97] DELAIRE (F.) – *Simulation numérique du comportement élastoviscoplastique d'un multicristal. Validation expérimentale*. Thèse de Doctorat, Université Paris 13, 1997.
- [DEL00] DELAIRE (F.), RAPHANEL (J.), REY (C.) – *Plastic Heterogeneities of a Copper Multicrystal Deformed in Uniaxial Tension : Experimental study and Finite Element Simulations*. Acta Materialia, vol. n°48, pp. 1075-1087, 2000.
- [ERI03] ERIEAU (P.) – *Etude expérimentale et analyse numérique de l'influence des hétérogénéités induites par la déformation à froid sur la recristallisation primaire d'un acier IF-Ti*. Thèse de Doctorat, Ecole Centrale Paris, 2003.
- [ERI04] ERIEAU (P.), REY (C.) – *Modelling of deformation and rotation bands and of deformation induced grain boundaries in IF steel aggregate during large plane strain compression*. International Journal of Plasticity, vol.n°20, pp. 1763-1788, 2004.
- [ESS79] ESSMAN (U.) et MUGRHRABI (H.) – *Annihilation of dislocations during tensile and cyclic deformation and limits of dislocations densities*. Phil. Mag., vol. A40, n°6, pp. 731-756, 1979.

[FRA83] FRANCIOSI (P.) – *Glide mechanisms in B.C.C. crystals : an investigation of the case of  $\alpha$ -iron through multislip and latent hardening tests*. Acta metallurgica, vol. 31, n°9, pp. 1331-1342, 1983.

[FRI64] FRIEDEL (J.) – *Dislocations*. Pergamon Press, 1964.

[HIR60] HIRSCH (P.R.) – 5th International Conference of Crystallography, Cambridge, p139, 1960.

[HOC99] HOC (T.) – *Etudes expérimentale et numérique de la localisation lors de changement de trajets dans un acier doux*.- Thèse de Doctorat, Ecole Centrale Paris, 1999.

[HOC01] HOC (T.), REY (C.), RAPHANEL (J.) – *Experimental and numerical analysis of localization during sequential tests for IF-Ti steel*. Acta Materialia, 2001, n°49, pp. 1835-1846.

[JAO60] JAOUL (B.) et GONZALEZ (D.) – *Déformation plastique de monocristaux de fer*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, vol. n°9, pp. 16-38, 1960.

[JOH90] JOHNSON (P.E.), SCHMITT (J.H.), VINCENT (S.A.), MORRIS (J.W.) – *The effect of prestrain temperatures on dislocation cell formation and subsequent tensile behaviour in low carbon steels*. Scripta Metallurgica, vol. n°24, pp. 1447-1452, 1990.

[KOC75] KOCKS (U. F.), ARGON (A.S) et ASHBY (M.F.) – *Thermodynamics and kinetics of slip*. Progress in Materials Science, vol. n°19, Pergamon Press Oxford, 1975

[KOC76] KOCKS (U. F.) – *Laws for work hardening and low-temperature creep*. J. Eng. Mat. Tech., january 1976, pp 76-85.

[KRO63] KROUPA (F.) Physica Status Solidi, vol. n°3, K391, 1963.

[LIN97] LINEAU (C.) – *Analyse expérimentale de la déformation plastique d'un polycristal d'acier. Comparaison avec simulations de modèles polycristallins*. Thèse de Doctorat, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, 1997.

[LOU78] KUBIN (L.P.), LOUCHET (F.), VESELY (D.) – *Description of low-temperature interstitial hardening of the b.c.c. lattice from in situ experiments*. Philosophical Magazine A, vol. n°38, pp. 205-221, 1978.

[LOU76] LOUCHET (F.) – *Plasticité des métaux de structure cubique centrée à basse température : déformation in-situ par microscopie électronique à haute tension*. Thèse de l'Université Paul Sabatier de Toulouse, 1976.

[MAN65] MANDEL (J.) – *Une généralisation de la théorie de la plasticité de H.T. Koiter*. International Journal of Solids and Structures, 1965, vol. n°1, pp. 273-295.

[MEC81] MECKING (H.), KOCKS (U.F.) – *Kinetics of flow and strain hardening*. Acta metallurgica, vol. n°29, pp. 1865-1875, 1981.



- [ORT99] ORTIZ (M.) et STAINIER (L.) – *The variational formulation of viscoplastic constitutive updates*. Computer methods in Applied Mechanics and Engineering, vol. n°171, Issues 3-4, pp: 419-444, 1999.
- [PEI83] PEIRCE (D.), ASARO (R.J.) et NEEDLEMAN (A.) – *Material rate dependence and localized deformation in crystalline solids*. Acta metallurgica, vol n°31, pp. 1951-1976, 1983.
- [RAU93] RAUCH (E.) – *Etude de l'écroutissage des métaux, aspects microstructuraux et lois de comportement*, Thèse de HDR, Institut National Polytechnique de Grenoble, 1993.
- [SEK04] SEKFALI (S.) – *Influence de la microstructure sur le comportement local dans les aciers 16MND5*. Thèse de Doctorat, Ecole Centrale Paris, 2004.
- [SPI79] SPITZIG (W.A.) et KEH (A.S.) – *Orientation dependence of the strain-rate sensitivity and thermally activated flow in iron single crystals*. Acta metallurgica, vol. n°18, pp 1021-1033, 1970.
- [STA02] STAINIER (L.), CUITIÑO (A.M.) et ORTIZ (M.) – *A micromechanical model of hardening, rate sensitivity and thermal softening in bcc single crystals* – Journal of the Mechanics and Physics of Solids, vol. n°50, pp. 1511-1545, 2002.
- [TAB92] TABOUROT (L.) – *Loi de comportement élastoviscoplastique du monocristal en grandes déformations*. Thèse de Doctorat, Institut National Polytechnique de Grenoble, 1992.
- [TAB98] TABOUROT (L.), FIVEL (M.), RAUCH (E.) – *Use of mesoscopic simulations to model the dislocations densities evolution law*. Proceedings Of the 19<sup>th</sup> Int. Symposium on Materials Science: Modelling of Structure and Mechanics of Materials from Microscale to Product, 1998, Risø National Laboratory, Roskilde, Denmark.
- [TAY38] TAYLOR (G.I.) – *Plastic strains in metals*. Journal of the Institute of Metals, vol. n°62, pp. 307-324, 1938.
- [TAY26] TAYLOR (G.I.), ELAM (C.F.) – *The distortion of iron crystals*. Proceedings of the Royal Society, vol. n°A118, pp. 337-361, 1926.
- [TEO91] TEODOSIU (C.), RAPHANEL (J.L.) et TABOUROT (L.)- *Finite implementation of the large elastoplastic deformation of multicrystals*. Large Plastic Deformation, Proc. Int. Seminar MECAMAT'91, ed. par TEODOSIU (C.), RAPHANEL (J.L.) et SIDOROFF (F.), pp. 153-168, 1991.
- [UEN03] UENISHI (A.) – *Comportement thermodynamique à grandes vitesses de déformation des aciers sans interstitiels à durcissement par solution solide*. Thèse de Doctorat, Université Paris 13, laboratoire LPMTM, 2003.

## Chapitre III

# **Caractérisation expérimentale**

## TABLE DES MATIÈRES

### III. Caractérisation expérimentale

<b>Introduction .....</b>	<b>59</b>
<b>III.A Caractérisation microstructurale du matériau .....</b>	<b>59</b>
<i>III.A.1 Matériau et élaboration .....</i>	<i>59</i>
<i>III.A.2 Caractérisation EBSD d'une taille de microstructure cristallographiquement représentative.....</i>	<i>61</i>
<i>III.A.3 Caractérisation au MET.....</i>	<i>63</i>
<b>III.B Essais de traction monotone .....</b>	<b>66</b>
<i>III.B.1 Eprouvettes et conditions expérimentales .....</i>	<i>66</i>
<i>III.B.2 Résultats / discussion .....</i>	<i>67</i>
<b>III.C Caractérisation du comportement thermiquement activé .....</b>	<b>72</b>
<i>III.C.1 Essais de sauts de vitesse .....</i>	<i>72</i>
<i>III.C.2 Essais de sauts de température .....</i>	<i>77</i>
<b>III.D Caractérisation de la transition ductile / fragile.....</b>	<b>82</b>
<i>III.D.1 Procédure expérimentale / mesure de la ténacité .....</i>	<i>83</i>
<i>III.D.2 Résultats .....</i>	<i>84</i>
<i>III.D.3 Comparaison avec une approche Master Curve.....</i>	<i>88</i>
<b>III.E Etude fractographique.....</b>	<b>93</b>
<i>III.E.1 Eprouvettes de traction simple.....</i>	<i>93</i>
<i>III.E.2 Eprouvettes CT.....</i>	<i>95</i>
<b>Conclusion du chapitre III .....</b>	<b>99</b>
<b>Références bibliographiques .....</b>	<b>100</b>

## Introduction

Le **chapitre III** présente une caractérisation expérimentale des deux microstructures et de leur comportement à différentes échelles. L'effet de la température et de la microstructure est également étudié :

- La partie **III.A** présente une caractérisation de la microstructure en EBSD et au MET.
- La limite d'élasticité et l'écroutissage sont caractérisés en traction simple dans le sous-chapitre **III.B**.
- Le comportement activé thermiquement est étudié dans la partie **III.C**.
- La sous-chapitre **III.D** fait l'objet d'une étude des valeurs expérimentales de ténacité et de leur dispersion en fonction de la température.
- La partie **III.E** est une synthèse des analyses fractographiques réalisées dans les éprouvettes de traction et CT.

## III.A Caractérisation microstructurale du matériau

### III.A.1 Matériau et élaboration

Le matériau étudié est un acier faiblement allié de type SA 508 C13. A l'état initial, il possède une structure bainitique revenue. Le matériau est fourni par le CEA et provient d'un coupon prélevé lors de la fabrication d'une tubulure de cuve de réacteur à eau pressurisée. La composition chimique du matériau est donnée dans le tableau III.1.

C	Mn	Si	Cr	Ni	Mo	S	P	Cu	Al
0.25	1.29	0.23	< 0.05	0.72	0.49	0.008	0.014	0.03	0.035

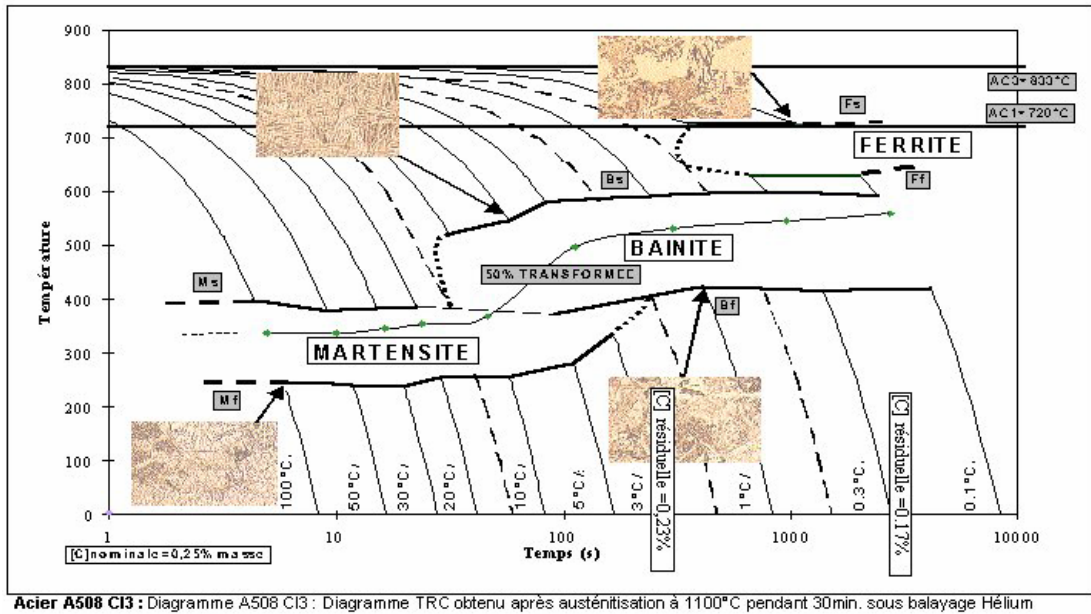
**Tableau III.1** : Composition chimique de l'acier A508 C13 (% massique)

A partir de l'état initial, deux microstructures modèles sont réalisées : une microstructure bainitique supérieure, ainsi qu'une microstructure martensitique. Ces deux matériaux modèles sont obtenus par trempe de la phase austénitique (figure III.1). Le rôle de la vitesse de trempe est de modifier la diffusion du carbone et donc la microstructure. La structure bainitique s'obtient pour des vitesses de trempe faibles, inférieures à 5°C/s, et la structure martensite pour des vitesses de trempe supérieures à 20°C/s.

L'austénitisation est effectuée à des températures de l'ordre de 1100°C, avec un temps de maintien de l'ordre de 30 minutes. Les deux microstructures ont été élaborées de la façon suivante :

- La microstructure bainitique supérieure obtenue après austénitisation à 1150°C et trempe à l'air à 0.4 °C/s dans le domaine de températures allant de 700 à 300 °C.

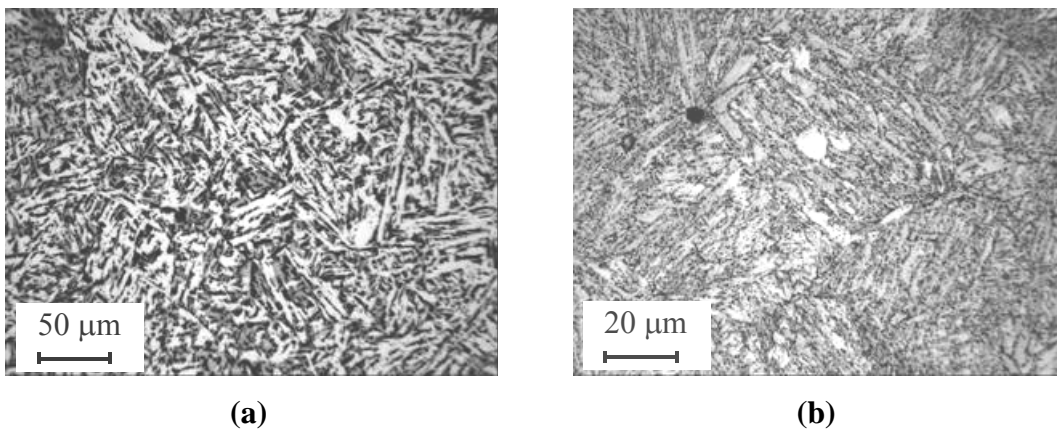
- La microstructure martensitique obtenue après austénitisation à 1150°C et trempe à l'eau à 50°C/s dans le domaine de températures allant de 700 à 300 °C.



**Fig. III.1 :** Diagramme TRC d'un acier faiblement allié Cu Ni Cr Mo V

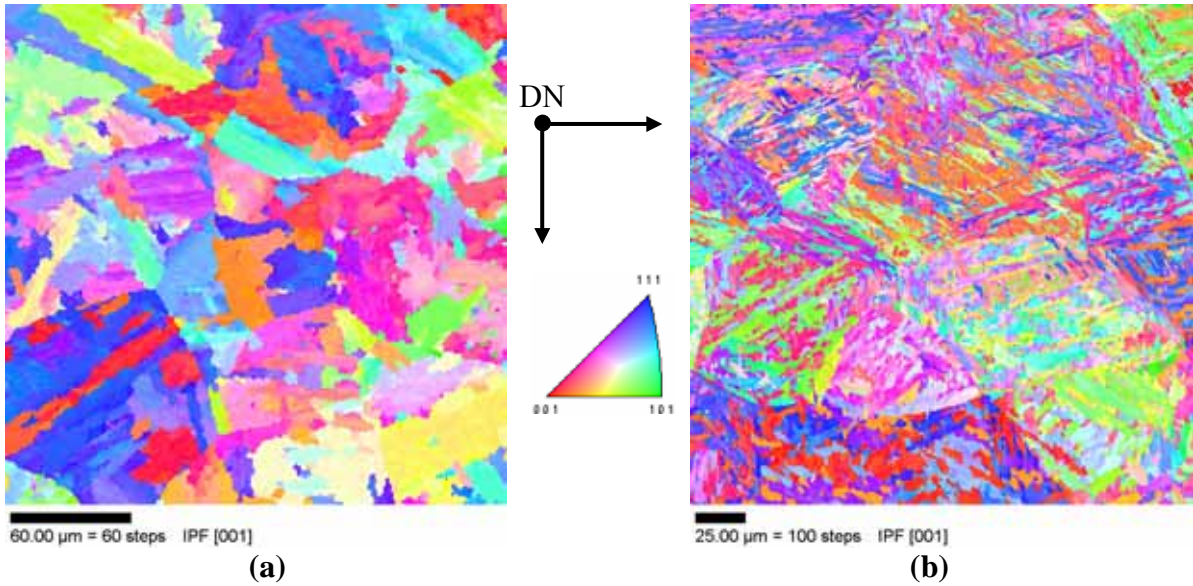
Le traitement de trempe a été suivi d'un détensionnement à 610 °C pendant 20 heures pour les 2 microstructures bainitique et martensitique.

Pour les deux microstructures et suite au traitement de trempe, les ex grains de phase  $\gamma$  sont subdivisés en paquets de lattes ayant une morphologie bien spécifique (fig. III.2).



**Fig. III.2 :** Micrographies optiques de la microstructure bainitique (a) et martensitique (b)

On note cependant quelques différences entre bainite et martensite : les paquets de lattes sont nettement plus fins pour la martensite avec une taille de l'ordre de 1 à 2  $\mu\text{m}$  (contre 10 à 20  $\mu\text{m}$  sur la bainite). Les lattes constituant les paquets sont également nettement plus fines sur le matériau ayant subi un traitement martensitique (100 à 200 nm contre 1 à 2  $\mu\text{m}$  sur la bainite)



**Fig. III.3 :** Cartographies EBSD de la microstructure bainitique **(a)** et martensitique **(b)**

Les carbures sont de plus grande taille et concentrés surtout aux joints de lattes dans la bainite, tandis que dans la martensite, ils sont nettement plus petits et dispersés, y compris à l'intérieur des joints de lattes.

### III.A.2 Caractérisation EBSD d'une taille de microstructure cristallographiquement représentative

La question de la taille d'agrégat cristallographiquement représentative a été caractérisée par analyse EBSD pour les microstructures bainitique et martensitique. L'étude a été réalisée par Françoise Barcelo et Jean Luc Béchade au laboratoire LA2M du CEA [BAR05]. Les cartographies EBSD ont été réalisées sur un MEB JEOL JSM 6400 avec le logiciel *HKL channel 5*.

La démarche a été la suivante : une cartographie EBSD a notamment été réalisée sur un domaine de  $850 \times 680 \mu\text{m}^2$  dans la microstructure bainitique. Ce domaine a été découpé en sous-domaines élémentaires de  $50 \times 50 \mu\text{m}^2$ . Par la suite, ces sous-domaines ont été regroupés pour constituer des plages de différentes tailles :  $150 \times 150 \mu\text{m}^2$ ,  $200 \times 200 \mu\text{m}^2$ ,  $300 \times 300 \mu\text{m}^2$ , etc. Cette approche a permis d'étudier l'influence de la taille de la plage sur deux indicateurs cristallographiques : l'indice de texture  $J$  d'une part, et la fonction de distribution des désorientations cristallographiques d'autre part. L'angle de désorientation, noté  $\theta$ , correspond au plus petit angle de rotation nécessaire pour amener deux points EBSD dans une même configuration. Pour la structure cubique centrée, cet angle est nécessairement compris entre 0 et  $60^\circ$ . MacKenzie a proposé une fonction théorique de distribution des angles de désorientation pour une texture isotrope [MAC64]. Pour chaque zone EBSD, on calcule la fonction de distribution des désorientations  $f(\theta_m)$  et on la compare à la fonction théorique par la relation suivante :

$$M = \sum_{\theta=0}^{60^\circ} |f(\theta_m) - f(\theta_{th})| \quad (\text{III.1})$$

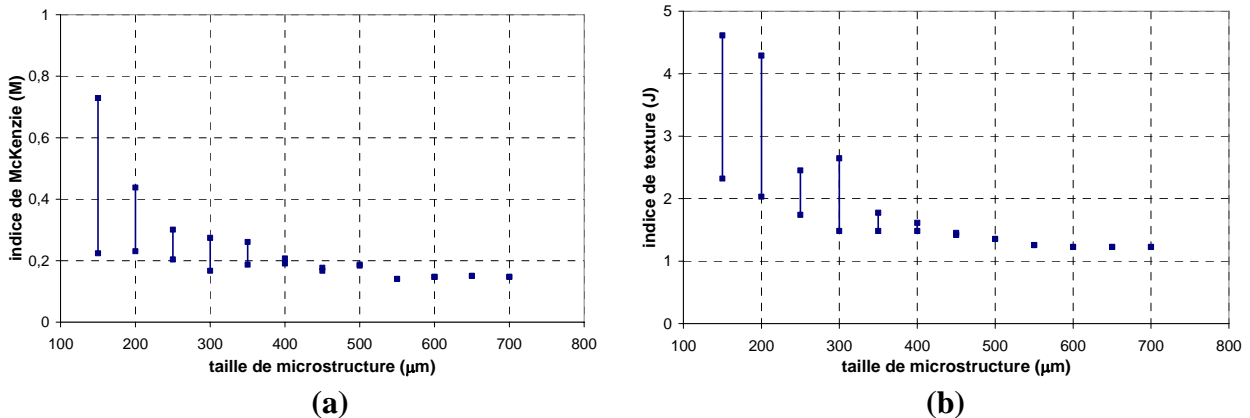
L'indice de texture  $J$  est quant à lui calculé à partir de la fonction de distributions des orientations cristallographiques (FDOC) notée  $F(g)$ .  $J$  tend vers 1 pour une texture isotrope, et les valeurs de  $J$  sont d'autant plus élevées que la texture est marquée :

$$J = \int [F(g)]^2 dg \quad (\text{III.2})$$

Afin de déterminer une taille d'agrégat cristallographiquement représentative, l'évolution des indices  $M$  et  $J$  est étudiée en fonction de la taille d'analyse en EBSD. Pour une taille de zone donnée, on peut constituer un ensemble de domaines indépendants et inclus dans la zone d'analyse globale de  $850 \times 680 \mu\text{m}^2$ . A titre d'exemple, 11 zones indépendantes de taille  $200 \times 200 \mu\text{m}^2$  ont été constituées à partir de l'ensemble de la zone balayée en EBSD. Sur les figures III.4.a et III.4.b, on donne le spectre des valeurs de  $M$  et  $J$  en fonction de la taille d'analyse EBSD.

La figure III.4.a montre que l'écart à la distribution théorique diminue progressivement lorsque la taille d'analyse EBSD augmente, mais sans tendre vers 0. La dispersion des valeurs de  $M$  devient négligeable pour une taille d'analyse de l'ordre de  $400 \times 400 \mu\text{m}^2$ .

Pour des tailles de zone EBSD inférieures à  $250 \times 250 \mu\text{m}^2$ , l'indice  $M$  peut atteindre des valeurs de l'ordre de 0,5, et la dispersion des valeurs de  $M$  est très élevée. L'indice de texture tend vers  $J=1$  mais pour une taille d'analyse de l'ordre de  $500 \times 500 \mu\text{m}^2$ . La dispersion des valeurs de  $J$  demeure très élevée jusqu'à  $300 \times 300 \mu\text{m}^2$ .

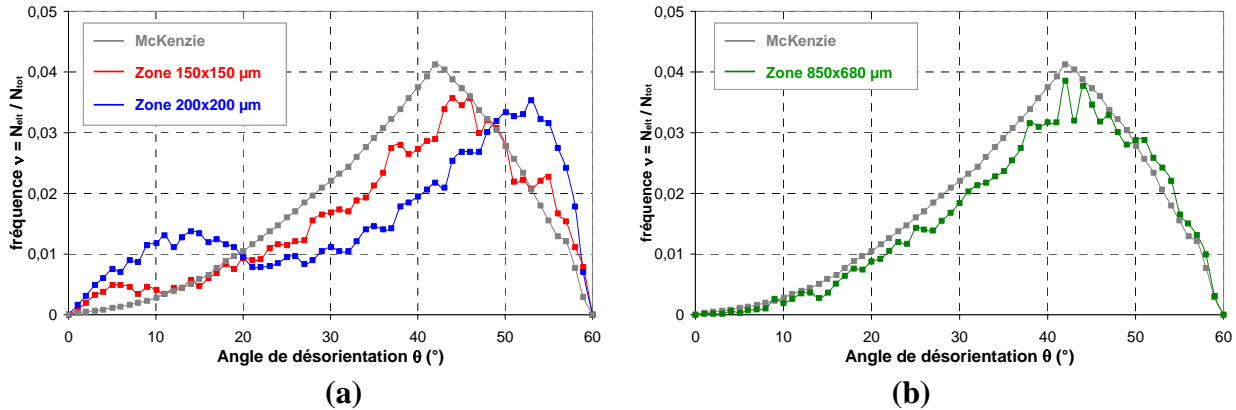


**Fig. III.4 :** Evolution de l'indice de Mc Kenzie (a) et de l'indice de texture (b) dans la bainite en fonction de la taille d'analyse en EBSD.

Compte tenu de la forte dispersion des valeurs de  $M$  et  $J$  observées pour des zones EBSD de taille inférieure ou égale à  $300 \times 300 \mu\text{m}^2$ , il est a priori possible de trouver des plages EBSD de  $150 \times 150 \mu\text{m}^2$  a priori plus représentatives d'une microstructure isotrope que d'autres plages de  $200 \times 200 \mu\text{m}^2$ . Ce résultat est confirmé par la comparaison des distributions de désorientations cristallines obtenues avec différentes tailles de zones EBSD (figure III.5.a).

Il apparaît en effet que l'écart à la distribution théorique de McKenzie peut être plus élevé pour une zone de  $200 \times 200 \mu\text{m}^2$  que pour une zone de taille  $150 \times 150 \mu\text{m}^2$ . Barcelo *et al.* considèrent que ces grandes dispersions sont liées à la taille des ex-grains austénitiques : dans une zone EBSD, les indices  $M$  et  $J$  deviennent d'autant plus faibles et moins dispersés que cette zone contient un grand nombre d'ex-grains austénitiques [BAR05]. D'autre part, même pour la zone d'analyse de  $850 \times 680 \mu\text{m}^2$ , l'écart à la distribution théorique ne tend pas

exactement vers 0. Globalement, dans la bainite, une zone de  $300 \times 300 \mu\text{m}^2$  est acceptable si on se réfère aux indices  $M$  et  $J$ . Dans la martensite, il est nécessaire de considérer une zone de  $200 \times 200 \mu\text{m}^2$ . Il est également envisageable de réaliser des analyses EBSD sur des domaines plus étendus (de l'ordre de  $500 \times 500 \mu\text{m}^2$  dans la bainite) mais avec un pas d'analyse plus grossier (par exemple  $2 \mu\text{m}$  au lieu de  $1 \mu\text{m}$ ) : cette démarche peut permettre d'améliorer la représentativité de la microstructure d'un point de vue cristallographique, mais en dégradant la description de la morphologie.



**Fig. III.5 :** Distribution des désorientations cristallines dans la bainite pour des plages de  $150 \times 150$  et  $200 \times 200 \mu\text{m}^2$  (a) et pour l'ensemble de la zone analysée en EBSD (b).

### III.A.3 Caractérisation au MET

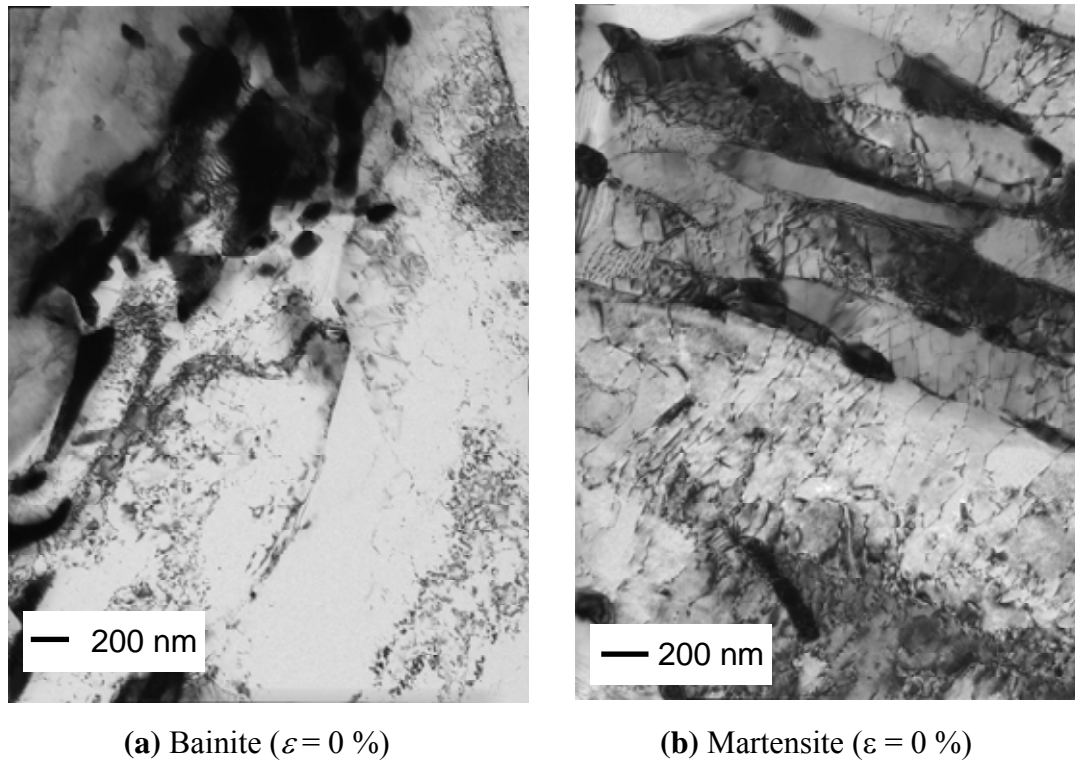
Il existe beaucoup d'incertitudes liées aux mesures de densités de dislocations (caractère local de la mesure, épaisseur de lame, dislocations en position d'extinction). Dans le cadre de la paramétrisation du modèle de comportement, ces mesures peuvent cependant fournir un ordre de grandeur. De plus, les observations MET, bien que qualitatives, peuvent être confrontées aux hypothèses relatives au modèle de comportement.

Des lames minces ont été réalisées pour les 2 microstructures bainitique et martensitique à l'état non déformé. Des échantillons d'épaisseur 300 à 400  $\mu\text{m}$  ont été découpés à l'aide d'une tronçonneuse de précision équipée d'un disque diamanté. Ils ont ensuite été amincis à l'aide du dispositif d'amincissement électrochimique Struers de type Tenupol-5 en utilisant les caractéristiques suivantes :

- solution d'attaque : 6% acide perchlorique + 94% méthanol ;
- température :  $-40^\circ\text{C}$  ;
- tension :  $U = 30 \text{ V}$  ;
- flux électrolyte : réglage 7.

Les lames minces ainsi obtenues ont été observées avec un microscope électronique en transmission de type JEOL 1200 EX (120 kV). Différentes lames ont été réalisées et plusieurs zones ont été observées en champ clair et en champ sombre afin d'étudier les hétérogénéités microstructurales à l'échelle d'une latte de bainite ou de martensite ( $< 1 \mu\text{m}$ ). L'ensemble des clichés et des observations microstructurales sur les matériaux non déformé et déformé sont présentés de façon détaillée dans l'**annexe D**. Ce paragraphe présente une synthèse des observations à l'état non déformé : ces données présentent un intérêt tout particulier dans le cadre de la modélisation du comportement plastique.





**Fig. III.6 :** Images MET en champ clair de la microstructure bainitique (a) et martensitique (b)

La figure III.6 présente 2 clichés réalisés en champ clair sur la bainite et la martensite. L'observation de l'ensemble des lattes minces nous a conduit à faire les remarques suivantes :

- Les joints de lattes présentent peu de différences de contraste, ce qui suggère une faible désorientation entre les lattes voisines. Des moirés de désorientation sont également observés à l'interface entre les lattes dans la bainite et dans la martensite.
- Les chapelets de taches sombres correspondent aux précipités de cémentite localisés près des joints de grains. La taille des carbures est de l'ordre de 200 à 300 nm. Nous n'observons que très peu de carbures à l'intérieur des lattes de bainite ou de martensite.
- Dans la bainite, l'épaisseur des lattes est de l'ordre du 1  $\mu\text{m}$ , ce qui confirme les observations réalisées au MEB et en analyse EBSD. Dans la martensite, la taille de latte est de l'ordre de 100 à 200 nm.
- Des joints de polygonisation sont observés à proximité des interfaces, surtout dans la martensite. A l'intérieur des lattes de martensite, les segments de dislocations adoptent une configuration rectiligne probablement due à une réorganisation de la microstructure lors du traitement thermique de revenu. Dans la bainite, la microstructure est plus homogène, même si des joints de flexion et de polygonisation sont observés localement.
- Nous ne constatons pas d'hétérogénéités microstructurales à l'échelle de la latte, que ce soit dans la bainite ou la martensite. Ces observations viennent conforter l'hypothèse de densités de dislocations initialement homogène dans le matériau. Cela correspond justement aux conditions initiales imposées dans les simulations de plasticité cristalline.

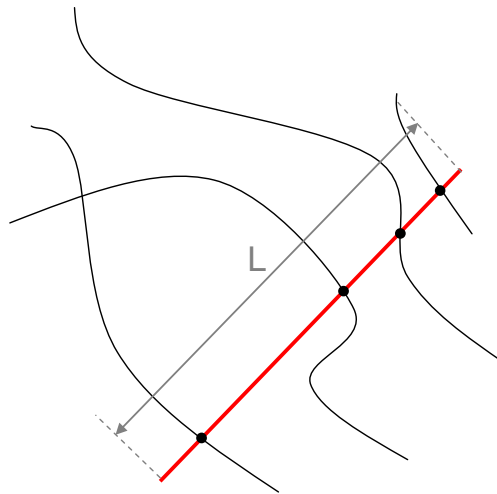
Les densités de dislocations ont été calculées sur chacun des clichés MET exploitables en comptant le nombre d'intersections entre les lignes de dislocations et plusieurs segments tracés sur les clichés (figure III.7). Si on considère que les dislocations sont distribuées aléatoirement dans l'espace, on peut montrer que la densité moyenne  $\rho$  s'obtient par la formule suivante :

$$\rho = \frac{2n}{Le_{lame}} \quad (\text{III.3})$$

Où  $n$  désigne le nombre d'intersections entre les dislocations et le segment,  $L$  la longueur du segment et  $e_{lame}$  l'épaisseur de la lame mince dans la zone d'observation.  $e_{lame}$  peut être mesurée à partir des franges d'épaisseur qui apparaissent sur certains clichés MET. Les mesures donnent une valeur de  $e_{lame}$  de l'ordre de 75 nm. Cependant cette valeur n'est donnée qu'à titre indicatif, l'épaisseur pouvant fluctuer grandement à proximité du bord de lame.

4 lames minces ont été exploitées pour mesurer  $\rho$  dans la bainite et la martensite. 6 clichés MET pris dans des zones différentes ont été utilisés pour chacune des lames minces. Nous obtenons les résultats suivants :

- bainite :  $\rho_0 = 2,8 \cdot 10^{14} \text{ m}^{-2}$  ;
- martensite :  $\rho_0 = 3,5 \cdot 10^{14} \text{ m}^{-2}$ .



**Fig. III.7 :** Schéma de principe du calcul de la densité moyenne de dislocations par comptage du nombre d'intersections

Les résultats détaillés dans l'**annexe D** montrent que ces valeurs ne fluctuent jamais de plus de 50% d'un cliché à l'autre, ce qui tend à conforter l'hypothèse d'une répartition homogène des densités initiales de dislocations (hypothèse qui a été reprise dans la modélisation).

Compte tenu des incertitudes liées aux mesures de  $\rho$ , nous nous sommes contentés de retenir l'ordre de grandeur de  $10^{14} \text{ m}^{-2}$  comme donnée d'entrée dans le modèle. D'autre part, les densités de dislocations ne sont pas significativement différentes entre bainite et martensite, ce qui nous amène à prendre  $\rho_0 = 10^{14} \text{ m}^{-2}$  pour les 2 microstructures.

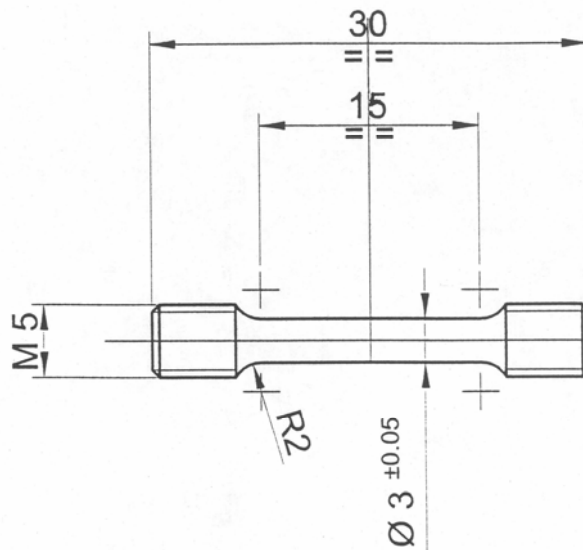
### III.B Essais de traction monotone

La caractérisation du matériau en traction répond à deux objectifs distincts :

- la construction d'une base d'essais de traction simple à différentes températures  $T$ , de manière à caractériser l'évolution de la limite élastique et de la pente d'écrouissage en fonction de  $T$  ;
- la réalisation d'essais de sauts de vitesses et de sauts de températures, afin de déterminer des grandeurs telles que le volume d'activation  $V^*$  et l'énergie d'activation  $\Delta G(\sigma_{eff})$ .

#### III.B.1 Eprouvettes et conditions expérimentales

Les éprouvettes utilisées sont de géométrie cylindrique ( $\phi_0 = 3$  mm) et de longueur utile  $L_0 = 15$  mm. Les essais de traction sont réalisés au laboratoire SRMA (CEA Saclay) sur une machine électromécanique ZWICK dont la cellule d'effort a une capacité de 10 kN. Un extensomètre INSTRON a été utilisé pour mesurer la déformation de l'éprouvette. L'extensomètre a été étalonné sur l'ensemble de sa base de mesure (10 mm +/- 1 mm) avec une précision de l'ordre de 1%.



**Fig. III.8** : Eprouvette de traction ronde  $\phi_0 = 3$  mm /  $L_0 = 15$  mm

Une enceinte isotherme couplée à une alimentation en azote liquide assure la régulation en température lors des essais. Une petite enceinte permet d'atteindre les températures les plus basses (-150 et -196°C) : le maintien à -196°C est assuré en remplissant l'enceinte d'azote liquide.

Les essais ont été pilotés en déplacement de traverse, de façon à avoir une vitesse de déformation d'environ  $5 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ . Un large domaine de températures a été exploré : 100°C, 25°C, -90°C, -150°C et -196 °C. Tous ces essais sont réalisés sur les 2 nuances bainitique et martensitique. Les courbes de traction à 0°C et 100°C sont données en **annexe B.1**.

Après avoir préalablement relevé la valeur du diamètre initial  $\phi_0$ , nous mesurons l'effort appliqué ainsi que le déplacement donné par l'extensomètre en cours d'essai. On en déduit :

- **Les courbes conventionnelles** représentant l'évolution de  $F/S_0$  en fonction de la déformation dite conventionnelle  $\varepsilon_c$  définie par :

$$\varepsilon_c = \frac{u}{L_0} \quad (\text{III.4})$$

Où  $S_0$  représente la section initiale de l'éprouvette,  $u$  désigne l'allongement de l'éprouvette (ou l'écartement des pattes de l'extensomètre par rapport à la position initiale) et  $L_0$  la longueur utile initiale de l'éprouvette (ou la base de mesure initiale de l'extensomètre).

- **les courbes rationnelles** représentant l'évolution de la contrainte vraie  $\sigma = F / S$  en fonction de la déformation rationnelle  $\varepsilon_r$  définie par la relation :

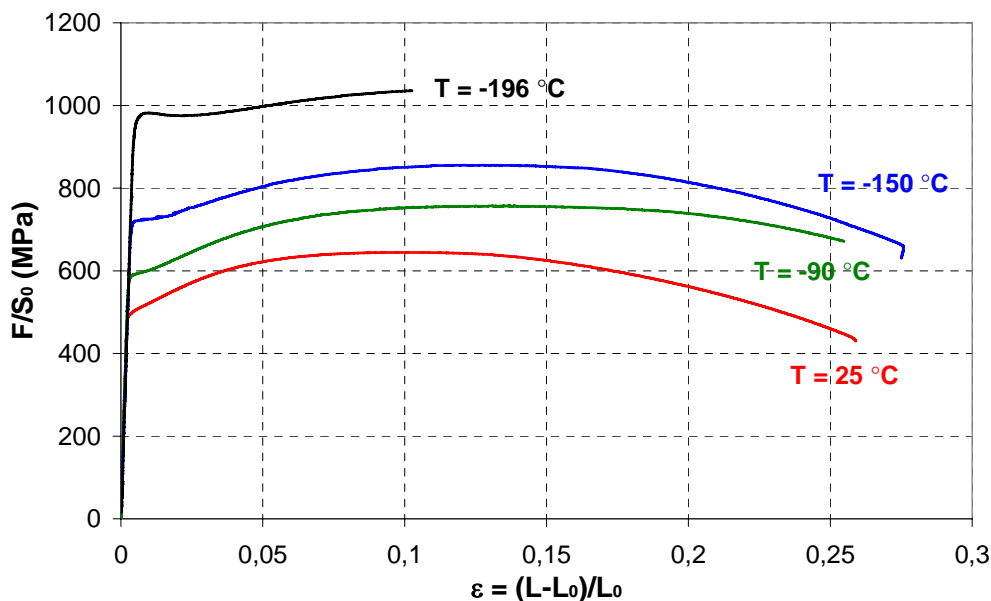
$$\varepsilon_r = \ln \frac{L}{L_0} \quad (\text{III.5})$$

En utilisant une hypothèse de conservation du volume (valable dès lors que la déformation élastique devient négligeable devant la déformation plastique), on peut en déduire une relation simple pour le calcul de  $S$  et  $\sigma$  :

$$S_0 L_0 = S L \quad \text{d'où} \quad \sigma = \frac{F}{S} = \frac{F L}{S_0 L_0} \quad (\text{III.6})$$

### III.B.2 Résultats / discussion

Les courbes conventionnelles sont données sur les figures III.9 et III.10 pour les deux microstructures bainitique et martensitique (courbes rationnelles en **annexe B**) :



**Fig. III.9 :** courbes  $F / S_0 = f(\varepsilon)$  dans la bainite (25, -90, -150 et -196 °C)

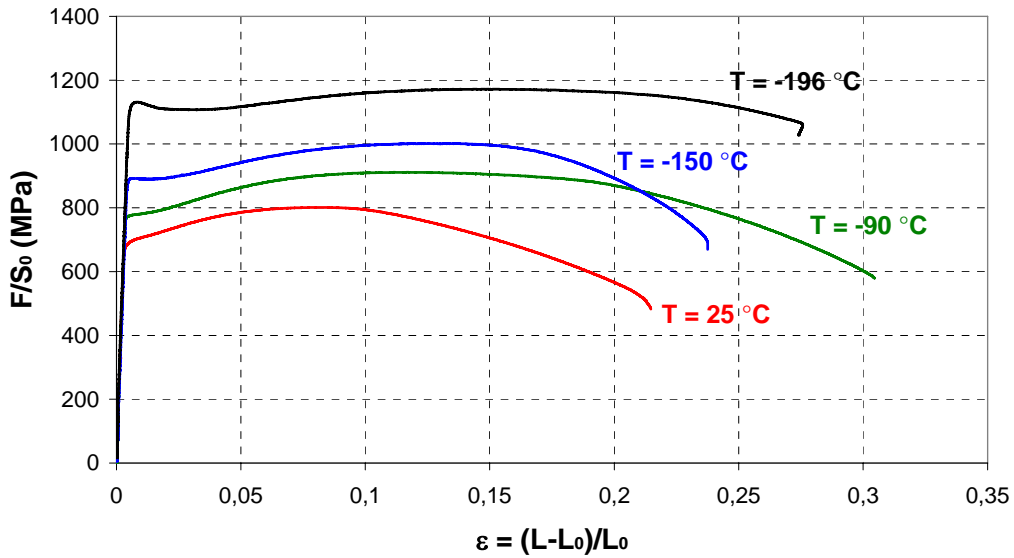


Fig. III.10 : courbes  $F/S_0 = f(\epsilon)$  dans la martensite (25, -90, -150 et -196°C)

a) Evolution de la limite d'élasticité  $R_{p0,2}$

Les courbes de traction conventionnelles ont permis de mesurer :

- la limite d'élasticité à 0,2 % de déformation plastique  $R_{p0,2}$  (figure III.11) ;
- la résistance maximale  $R_m$  (figure III.12) ;
- l'allongement plastique réparti  $A_g$  et l'allongement plastique à rupture  $A_r$ . L'évolution de ces deux caractéristiques en fonction de la température est fournie en **annexe B**.

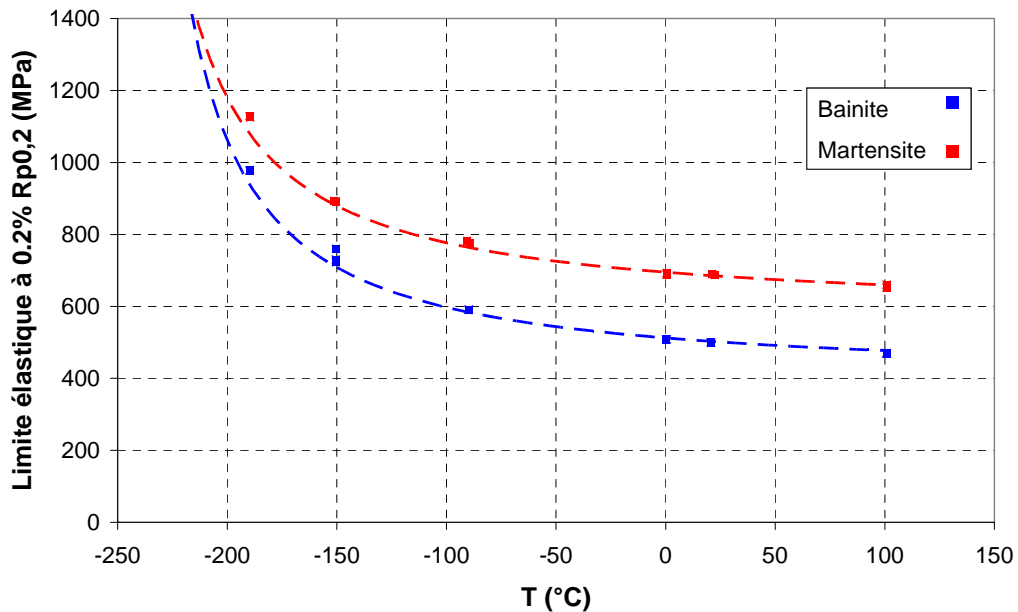
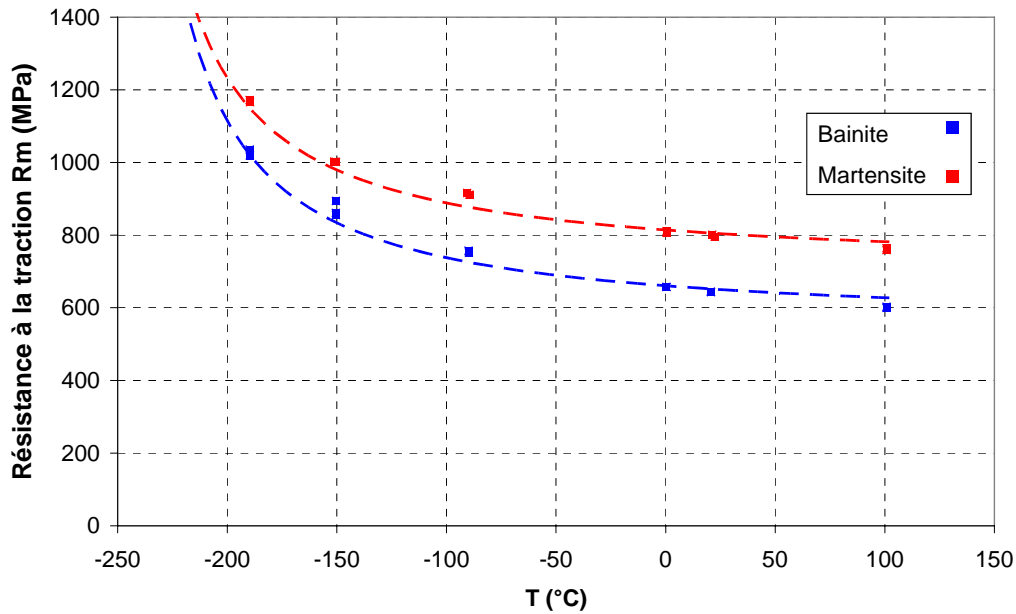


Fig. III.11 : Evolution de la limite d'élasticité  $R_{p0,2}$  en fonction de  $T$  (ajustement sur la loi de type  $C \exp(-E/kT)$  en pointillés)



**Fig. III.12 :** Evolution de la résistance maximale  $R_m$  en fonction de  $T$  (ajustement sur la loi de type  $C \exp(-E/kT)$  en pointillés)

$R_{p_{0,2}}$  et  $R_m$  décroissent lorsque la température augmente pour les deux nuances bainitique et martensitique. L'effet de la température est assez peu marqué au dessus de  $T = -90^\circ\text{C}$ , mais elle devient plus significatif pour les températures les plus basses. L'effet de  $T$  est également plus marqué sur la limite d'élasticité  $R_{p_{0,2}}$  que sur la résistance maximale  $R_m$ . Cette constatation n'a rien de surprenant dans la mesure où le module d'écroutissage semble légèrement décroître avec  $T$ .

A  $T = -196^\circ\text{C}$ , le comportement de la bainite devient fragile : les valeurs de  $R_{p_{0,2}}$  et  $R_m$  sont d'autant plus proches que  $T$  diminue.

A une température donnée, la nuance martensitique présente une plus grande limite d'élasticité  $R_{p_{0,2}}$  et une meilleure résistance à la traction  $R_m$  que la bainite, ce qui est sans doute lié à la microstructure plus fine. On constate également un effet très marqué de la température sur la limite d'élasticité, surtout entre 25, -90, -150 et  $-196^\circ\text{C}$ . Cette influence de la température sur  $R_{p_{0,2}}$  est nettement moins évidente si l'on compare les essais à  $0^\circ\text{C}$ ,  $25^\circ\text{C}$  et  $100^\circ\text{C}$ .

Enfin, il apparaît que l'écart entre bainite et martensite tend à diminuer lorsque  $T$  diminue, c'est-à-dire lorsque l'on s'éloigne de la température de transition de comportement macroscopique. Une étude plus détaillée est disponible en **annexe B.1** : une loi de type Arrhénius est proposée pour décrire les évolutions de  $R_{p_{0,2}}$  et  $R_m$  en fonction de  $T$ .

### b) Evolution du module d'écroutissage $d\sigma/d\varepsilon$

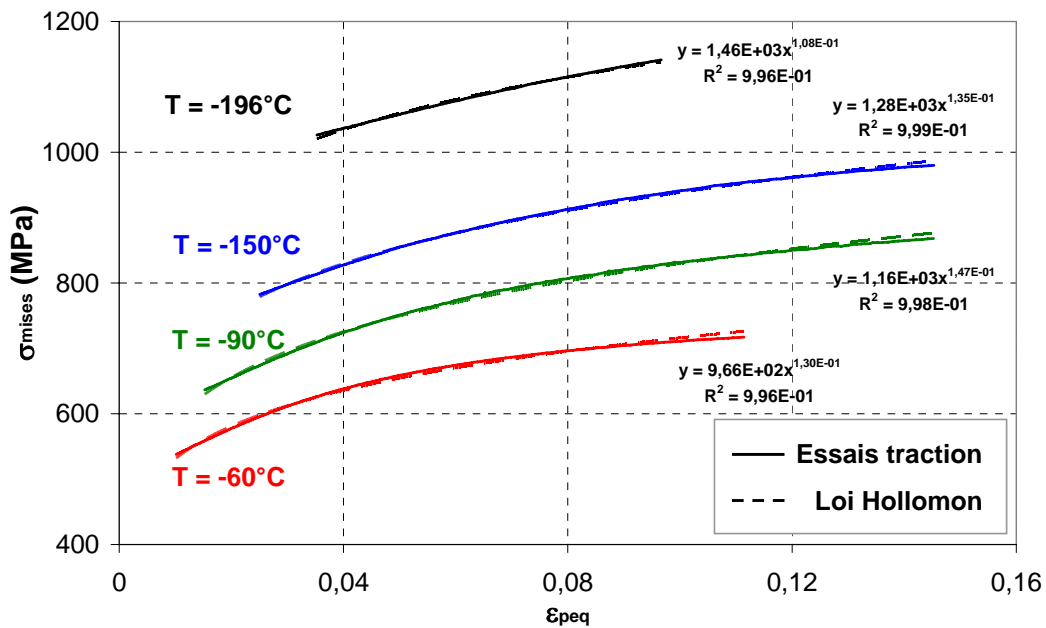
Les courbes de traction représentées sur les figures III.9 et III.10 ne montrent que peu de différences de module d'écroutissage entre la bainite et martensite. On constate l'apparition d'un palier en début de courbe, d'autant plus marqué que la température est faible. Le palier est également plus marqué dans la martensite que dans la bainite. Il s'agit très certainement de paliers de type Lüders correspondant à un phénomène d'ancrage / désancrage des dislocations

en début de plasticité. Ces paliers ont également été observés dans des aciers faiblement alliés 16MND5 par Renevey [REN98] et Pesci [PES04], ainsi que dans des aciers martensitiques [BON04]. Les instabilités plastiques peuvent également être de nature géométrique. En effet, la plasticité s'initie à proximité des congés de raccordement de l'éprouvette du fait des facteurs de concentration. Par la suite, la déformation devient homogène dans la zone utile et ces instabilités disparaissent.

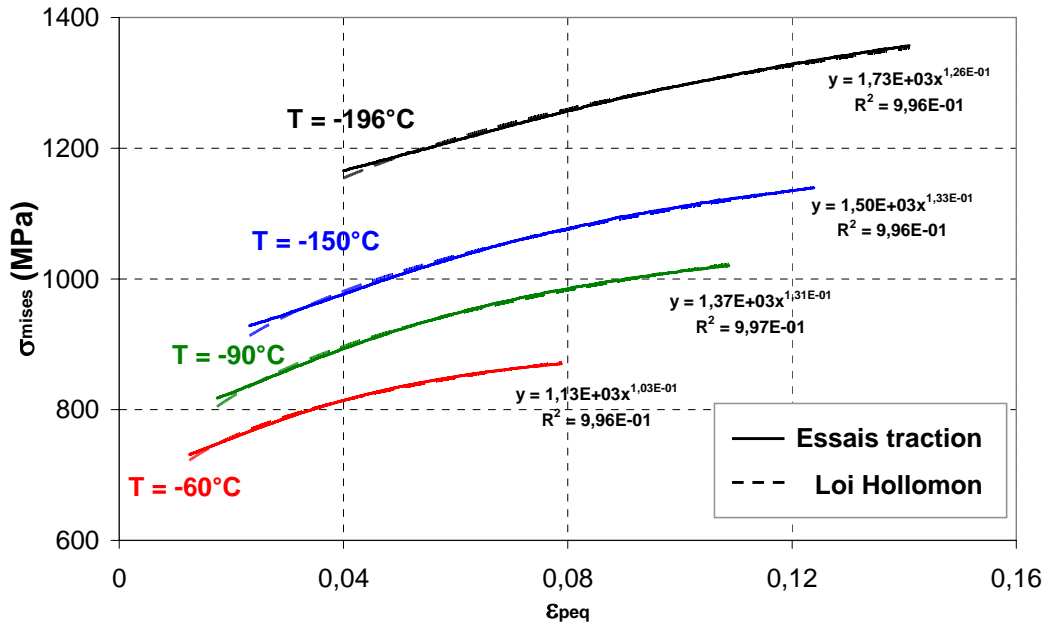
Le module d'écroutissage semble légèrement plus élevé dans la bainite que dans la martensite, mais il semble décroître avec la température. Afin de quantifier l'effet de la microstructure et de la température sur l'écroutissage, nous avons identifiés une loi de comportement plastique macroscopique de type Hollomon sur les courbes de traction simple :

$$\langle \sigma_{mises} \rangle = K \langle \varepsilon_{eq}^p \rangle^n \quad (III.7)$$

Les paramètres  $K$  et  $n$  ont été identifiés pour la bainite et la martensite à partir des courbes de traction rationnelles en déformation plastique (figures III.13 et III.14). Les paliers de Lüders sont retirés des courbes de traction car ils correspondent à un état de déformation hétérogène dans les éprouvettes.



**Fig. III.13 :** Identification des paramètres  $K$  et  $n$  de la loi Hollomon à partir des courbes de traction simple (bainite)



**Fig. III.14 :** Identification des paramètres  $K$  et  $n$  de la loi Hollomon à partir des courbes de traction simple (martensite)

Le tableau III.2 récapitule l'évolution des valeurs de  $K$  et  $n$  en fonction de  $T$  pour les deux microstructures.

Température (°C)	Paramètre $K$		Exposant $n$	
	Bainite	Martensite	Bainite	Martensite
25	966	1130	0,130	0,103
-90	1160	1370	0,147	0,131
-150	1280	1500	0,135	0,133
-196	1460	1730	0,108	0,126

**Tableau III.2 :** Evolution des coefficients d'érouissage  $K$  et  $n$  en fonction de  $T$  (bainite & martensite)

Si le paramètre  $K$  n'a pas de signification physique particulière, l'exposant  $n$  définit en principe la déformation plastique à striction. Cet exposant est en moyenne plus élevé dans la bainite que dans la martensite, sauf pour  $T = 25^\circ\text{C}$ . Cela peut laisser penser que l'érouissage sature plus précocement dans la bainite que dans la martensite.

D'autre part,  $n$  semble croître avec  $T$  dans la bainite, mais cette tendance est inversée dans la martensite. Il est difficile d'estimer précisément l'effet de la température et de la microstructure sur la saturation de l'érouissage.

Cette paramétrisation permet également d'étudier l'évolution du module d'érouissage  $\theta$ . Pour un niveau de déformation  $\langle \varepsilon_{eq} \rangle$  donné,  $\theta$  se déduit des valeurs de  $K$  et  $n$  par la relation :



$$\theta = \frac{d \langle \sigma_{mises} \rangle}{d \langle \varepsilon_{eq}^p \rangle} = K n \langle \varepsilon_{eq}^p \rangle^{n-1} \quad (\text{III.8})$$

Le tableau III.3 récapitule les valeurs de  $\theta$  mesurées dans la bainite et la martensite pour deux niveaux de déformation :  $\langle \varepsilon_{eq} \rangle = 5$  et  $10 \%$ .

Température (°C)	Bainite		Martensite	
	$\langle \varepsilon_{eq} \rangle = 5 \%$	$\langle \varepsilon_{eq} \rangle = 10 \%$	$\langle \varepsilon_{eq} \rangle = 5 \%$	$\langle \varepsilon_{eq} \rangle = 10 \%$
<b>25</b>	1700	931	1710	921
<b>-90</b>	2200	1220	2430	1330
<b>-150</b>	2310	1270	2680	1470
<b>-196</b>	2290	1230	3000	1640

**Tableau III.3 :** Evolution du module d'écroissage calculé à partir de  $K$  et  $n$  en fonction de  $T$  et  $\langle \varepsilon_{eq} \rangle$  dans la bainite et la martensite

Dans la bainite et la martensite, on constate que le module d'écroissage  $\theta$  diminue bien lorsque  $\langle \varepsilon_{eq} \rangle$  augmente (saturation de l'écroissage). D'autre part, les valeurs de  $\theta$  sont d'autant plus élevées que  $T$  est faible. Cette observation est vérifiée pour les deux microstructures, et à  $\langle \varepsilon_{eq} \rangle = 5$  et  $10 \%$ . Dans l'ensemble, les valeurs de  $\theta$  sont plus élevées dans la martensite que dans la bainite, sauf pour  $T = 25^\circ\text{C}$  où ces valeurs de  $\theta$  sont comparables. Ceci peut s'expliquer par une plus grande finesse de la microstructure martensitique : le libre parcours moyen des dislocations serait plus faible, ce qui favoriserait le durcissement au cours de la déformation. Par ailleurs, les valeurs de module d'écroissage sont du même ordre que celles mesurées dans un acier Fe-Cr martensitique par Bonadé *et al.* [BON04].

Si, pour  $T < 25^\circ\text{C}$ , la limite d'élasticité et le module d'écroissage sont fortement dépendants de la température, les courbes de traction obtenues à  $100^\circ\text{C}$ ,  $25^\circ\text{C}$  et  $0^\circ\text{C}$  sont très peu différentes (cf. **annexe B**). De même, on montre que l'effet de la vitesse de sollicitation sur l'écroissage (entre les essais à  $5 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$  et  $5 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ ) n'est pas flagrant à  $T = 25^\circ\text{C}$ , mais qu'il devient nettement plus significatif à  $T = -150^\circ\text{C}$ .

Pour  $T < 25^\circ\text{C}$ , il est ainsi crucial de caractériser non seulement la limite d'élasticité et l'écroissage, mais également la nature thermiquement activée du comportement plastique.

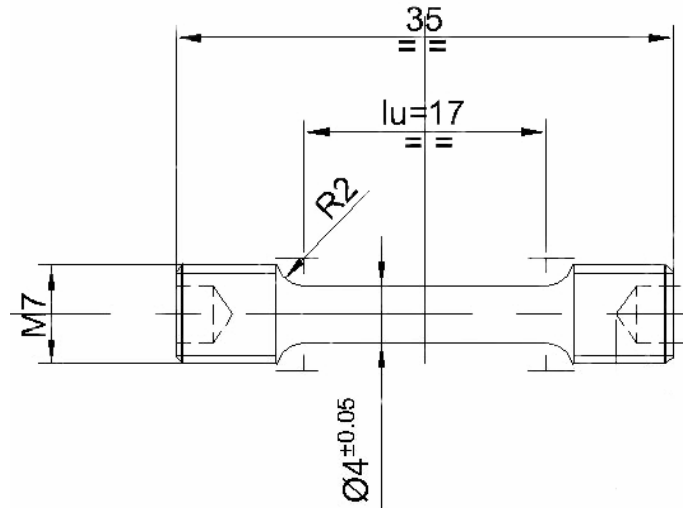
### III.C Caractérisation du comportement thermiquement activé

#### III.C.1 Essais de sauts de vitesse

L'objectif de cette partie consiste à mesurer l'effet de la vitesse de déformation sur la contrainte d'écoulement du matériau, et ce à différentes températures. La mesure du volume d'activation  $V^*$  permet de quantifier cet effet.

**a) Conditions expérimentales**

Tous les essais ont été réalisés sur une machine servo-hydraulique INSTRON de capacité 250 kN munie d'une cellule d'effort de 50 kN. Nous avons réalisé des éprouvettes cylindriques de diamètre  $\phi_0 = 4$  mm et de longueur utile  $L_0 = 17$  mm (figure III.15).



**Fig. III.15 :** Eprouvettes de traction pour l'étude de sauts de vitesse et température

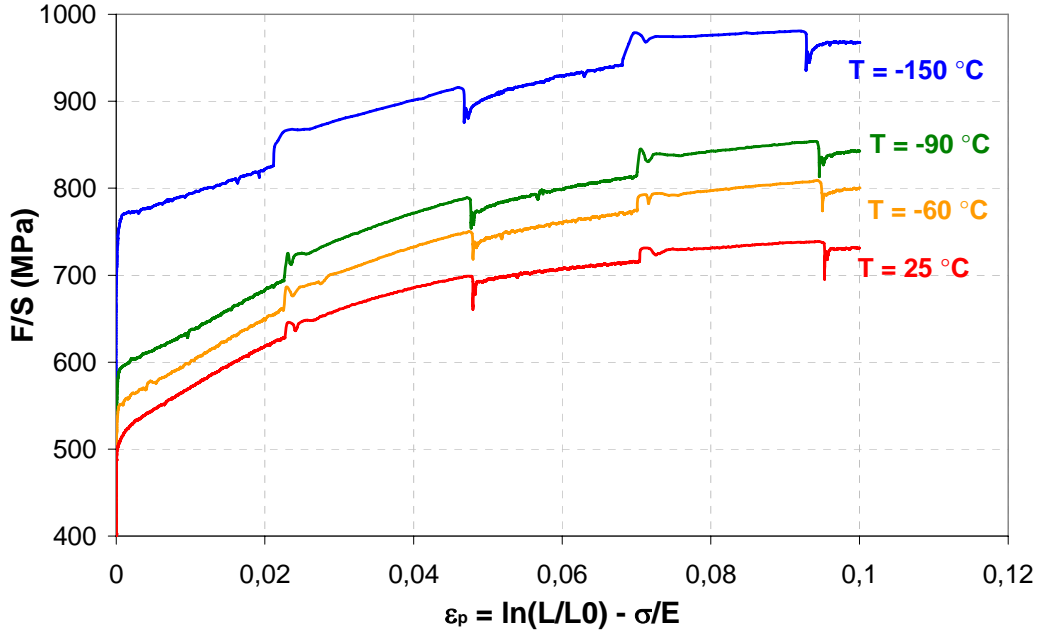
Un extensomètre INSTRON a servi à l'acquisition de la déformation de la partie utile de l'éprouvette avec une erreur inférieure à 1% sur toute la base de mesure.

Les essais ont été pilotés en vitesse de déplacement du vérin. Tous les sauts ont été réalisés avec une amplitude d'une décade entre deux vitesses de déformation  $\dot{\epsilon}_{\text{vérin}}$  de  $5 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$  et  $5 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ . Les sauts sont effectués tous les 2,5 % de déformation jusqu'à rupture de l'éprouvette. Afin d'étudier l'influence de la température sur l'effet de viscosité, des essais ont été réalisés à 25°C, -90°C et -150°C pour le matériau bainitique et à 25°C, -60°C, -90°C, -150°C et -196°C sur le matériau martensitique. L'ensemble des essais sont réalisés dans l'enceinte régulée en température adaptée sur la machine INSTRON 250 kN. Une enceinte de plus petite taille a été utilisée pour assurer une régulation optimale à -150°C.

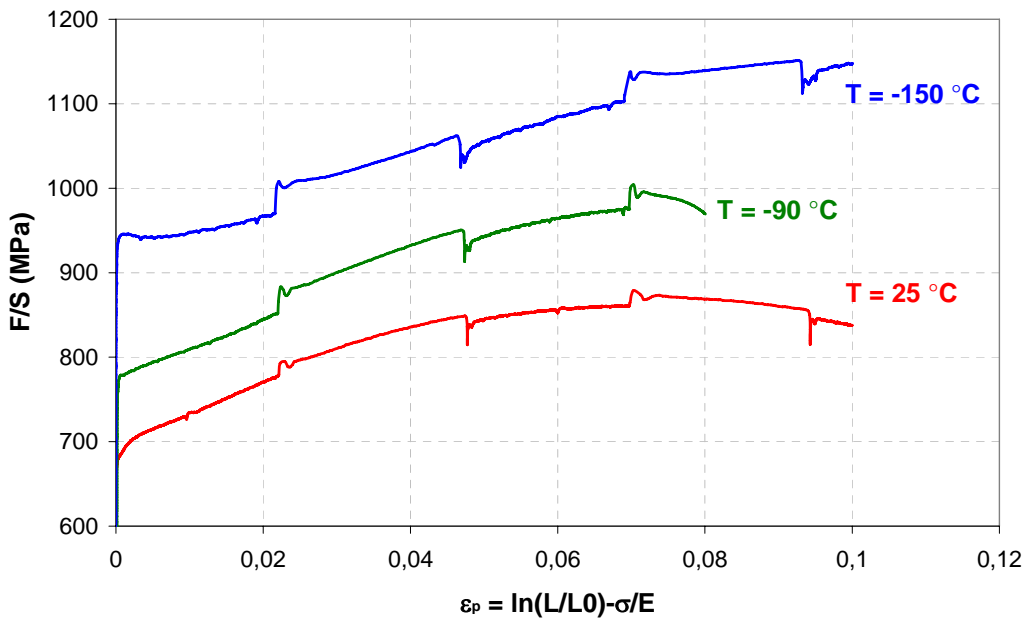
**b) Résultats : courbes de sauts de vitesse**

Les courbes contrainte vs déformation rationnelle obtenues sur le matériau bainitique (figure III.16) montrent que l'amplitude des sauts de contrainte  $\Delta\sigma$  est d'autant plus grande que la température est faible. Les oscillations qui apparaissent à chaque saut sont la conséquence du réglage de l'asservissement du vérin. Elles peuvent générer des incertitudes dans les mesures de  $\Delta\sigma$ . Pour les mesures de  $\Delta\sigma$ , nous nous sommes affranchis du 'début de saut' comportant des oscillations. Les limites d'élasticité obtenues sur les courbes de traction monotones et les sauts de vitesse présentent des dispersions de l'ordre de 5 à 20 MPa, qui peuvent être liées à une légère hétérogénéité microstructurale du massif ayant servi à la découpe des éprouvettes.

Les essais de sauts de vitesse menés sur la nuance martensitique (figure III.17) conduisent à des résultats assez similaires : les valeurs de  $\Delta\sigma$  sont très comparables à celles obtenues sur la bainite.

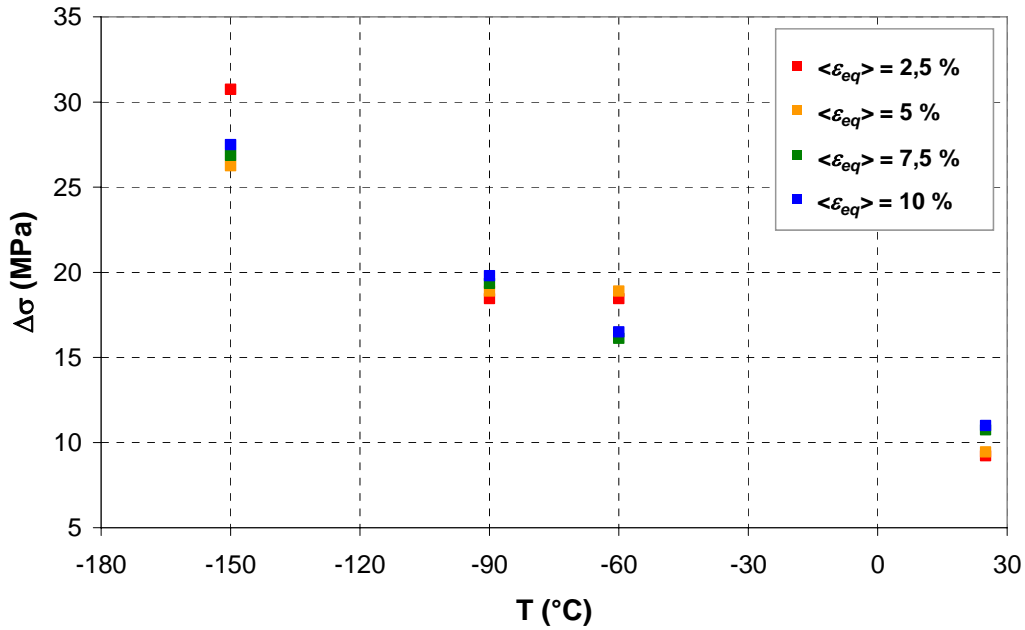


**Fig. III.16 :** Courbes de sauts de vitesse  $F/S = f(\varepsilon_{peq})$  (bainite)

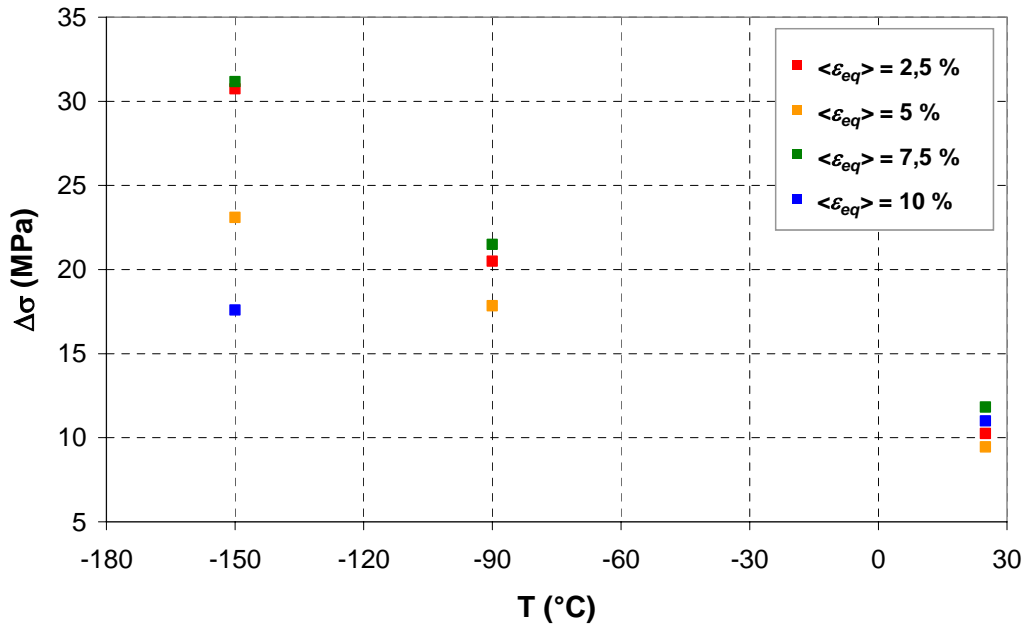


**Fig. III.17 :** Courbes de sauts de vitesse  $F/S = f(\varepsilon_{peq})$  (martensite)

Les valeurs de  $\Delta\sigma$  sont données en **annexe B.2** et leurs évolutions avec la température sont tracées sur les figures III.18 et III.19.



**Fig. III.18 :** Evolution des sauts  $\Delta\sigma$  en fonction de  $T$  dans la bainite



**Fig. III.19 :** Evolution des sauts  $\Delta\sigma$  en fonction de  $T$  dans la martensite

L'amplitude des sauts dépend significativement de la température et elle est d'autant plus faible que la température augmente. Ce phénomène met en évidence une augmentation de la contrainte effective  $\sigma_{eff}$  (contribution de l'activation thermique) et du volume d'activation  $V^*$  avec  $T$ , comme on le montrera par la suite. Par ailleurs, l'amplitude des sauts  $\Delta\sigma$  dépend peu du taux de déformation  $\varepsilon$  au cours d'un même essai.

**c) Mesure du volume d'activation  $V^*$**

Si l'on considère que la théorie de l'activation thermique s'applique à une échelle macroscopique, il est possible de relier le volume d'activation  $V^*$  à l'amplitude des sauts  $\Delta\sigma$ . Considérons simplement une loi d'écoulement viscoplastique reliant la vitesse de déformation plastique  $\dot{\epsilon}^p$  à la contrainte effective  $\sigma_{eff}$ :

$$\dot{\epsilon} = \dot{\epsilon}_0 \exp\left[\frac{-\Delta G(\sigma_{eff})}{kT}\right] \quad (III.9)$$

Où  $\dot{\epsilon}_0$  désigne une vitesse de référence,  $\Delta G$  l'énergie libre d'activation associée au mécanisme d'activation thermique considéré,  $k$  la constante de Boltzmann et  $T$  la température. Le volume d'activation se définit comme la dérivée partielle de  $\Delta G$  par rapport à  $\sigma_{eff}$ :

$$\Delta G = \Delta G_0 - V^* \sigma_{eff} \quad (III.10)$$

L'expression de la loi d'écoulement pour deux vitesses de déformation plastique  $\dot{\epsilon}_1^p$  et  $\dot{\epsilon}_2^p$  (avec  $\dot{\epsilon}_1^p > \dot{\epsilon}_2^p$ ) conduit à une relation faisant intervenir le saut de contraintes  $\Delta\sigma = \sigma_{eff}^1 - \sigma_{eff}^2$ :

$$\frac{\dot{\epsilon}_1^p}{\dot{\epsilon}_2^p} = \exp\left[\frac{V^*(\sigma_{eff}^1 - \sigma_{eff}^2)}{kT}\right] \quad (III.11)$$

On en déduit l'expression du volume d'activation en fonction de  $\Delta\sigma$ :

$$V^* = \frac{kT}{\Delta\sigma} \Delta \ln \dot{\epsilon} \quad (III.12)$$

Les valeurs de  $V^*$  calculées par cette relation sont données dans le tableau III.4 (les courbes décrivant l'évolution de  $V^*$  en fonction de  $\varepsilon$  figurent dans l'**annexe B.2**):

Température (°C)	$V^*$ (b <sup>3</sup> )	
	Bainite	Martensite
25	55	54
-60	25	
-90	20	18
-150	9	10

**Tableau III.4 :** Comparaison des valeurs de  $V^*$  obtenues à différentes températures pour les microstructures bainitique et martensitique

Les valeurs de  $V^*$  mesurées sont peu différentes entre la bainite et la martensite et ce, quelle que soit la température. Cela suggère que les mécanismes d'activation thermique sont très similaires d'une microstructure à l'autre. L'activation thermique semble affecter uniquement le comportement de la matrice ferritique constitutive des lattes. La localisation et la taille des carbures dans les deux microstructures ne semblent pas avoir d'influence significative sur les valeurs de  $V^*$ . On note une bonne concordance entre les valeurs obtenues expérimentalement et celles mesurées dans d'autres nuances d'aciers faiblement alliés [BÖH01]. Les valeurs de  $V^*$  sont également assez proches de celles mesurées expérimentalement dans le fer pur [COT78].

Il faut rester prudent lorsque l'on transpose des résultats expérimentaux macroscopiques à des mécanismes d'activation thermique agissant à l'échelle d'un brin de dislocation vis sans effectuer de changement d'échelle. Il est néanmoins admis [UET03] que les valeurs de  $V^*$  obtenues expérimentalement doivent être du même ordre de grandeur que celles reliées aux mécanismes mis en jeu à l'échelle microscopique.

Si l'on veut procéder au changement d'échelle, la méthode la plus simple consiste à prendre arbitrairement  $\tau_{eff} = \sigma_{eff} / 2$  (Harding [HAR69], Tanaka & Watanabe [TAN71], Spitzig & Leslie [SPL71]), ce qui conduit à une relation entre le volume d'activation apparent  $V^*$  et le volume d'activation 'microscopique'  $V_\tau^*$  :

$$V_\tau^* = - \left. \frac{\partial \Delta G}{\partial \tau_{eff}} \right|_{T,\varepsilon} \approx -2 \left. \frac{\partial \Delta G}{\partial \sigma_{eff}} \right| \approx 2V^* \quad (\text{III.13})$$

D'autre part, comme les sauts  $\Delta\sigma$  n'évoluent pas en cours d'essai, il en va par conséquent de même pour les valeurs de  $V^*$  qui semblent peu sensibles à l'évolution de la déformation (cf. courbes  $V^* = f(\varepsilon)$  en **annexe B.2**).

A terme, les mesures expérimentales de sauts de vitesse et de  $V^*$  permettront d'identifier les paramètres de la loi de comportement cristalline décrivant le comportement d'un agrégat de grains.

### III.C.2 Essais de sauts de température

Des essais de sauts de température ont également été conduits avec le dispositif expérimental déjà utilisé pour les sauts de vitesse. L'objectif est ici d'évaluer l'effet de la déformation à la fois sur l'amplitude des sauts et sur l'évolution de l'écrouissage à une température donnée. Les sauts de température peuvent mettre en évidence, de par la présence d'une rupture de pente d'écrouissage, le passage d'un comportement de type basse température à un comportement plus caractéristique du régime athermique. Ces essais, couplés à des mesures de sauts de vitesse, visent également à mesurer l'énergie libre d'activation  $\Delta G$  à une température donnée.

#### a) Conditions expérimentales

Des sauts de température sont réalisés entre  $-150^{\circ}\text{C}$  et  $-196^{\circ}\text{C}$  sur les 2 microstructures tous les 2,5 % de déformation. La régulation à  $-150^{\circ}\text{C}$  est assurée dans la petite enceinte, tandis que l'on immerge l'échantillon dans l'azote liquide pour atteindre  $-196^{\circ}\text{C}$ .

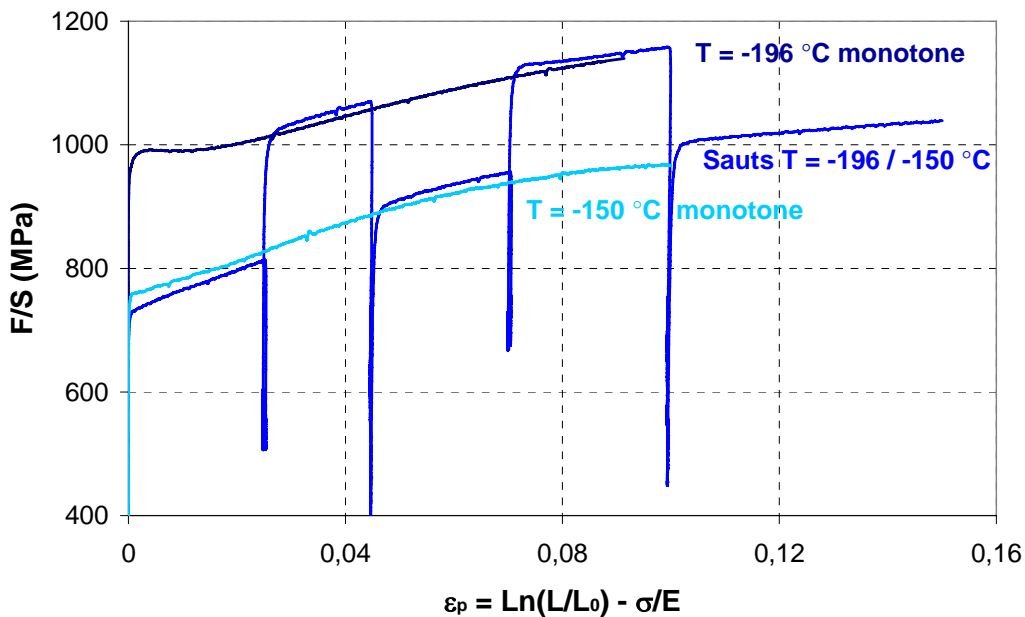
Afin d'assurer une régulation efficace de l'enceinte lors de la transition entre deux températures, l'éprouvette est déchargée progressivement lors de la mise en température.

Cette précaution permet également d'éviter que les phénomènes de dilatation / contraction des amarrages de traction entraînent une déformation plastique de l'éprouvette.

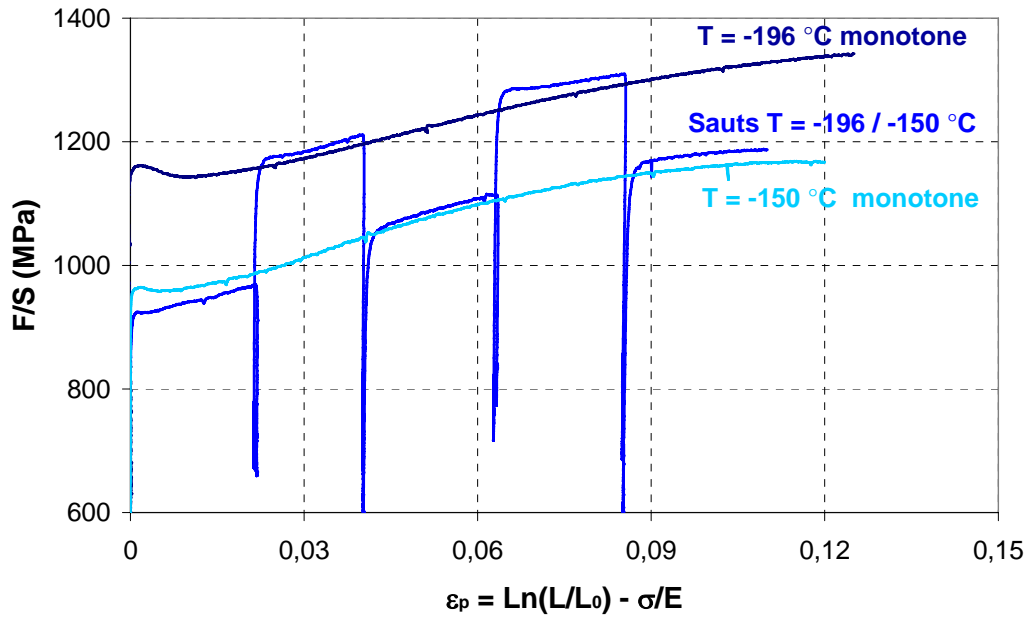
Une démarche analogue a été appliquée pour réaliser des sauts de température dans le régime de comportement athermique, entre  $37$  et  $0^{\circ}\text{C}$ . Nous avons choisi  $37^{\circ}\text{C}$  au lieu de  $25^{\circ}\text{C}$  afin d'augmenter l'amplitude du saut. Pour réguler l'enceinte à  $0^{\circ}\text{C}$ , nous avons introduit dans l'enceinte un mélange d'eau et de glaçons.

### b) Résultats : courbes de sauts de température

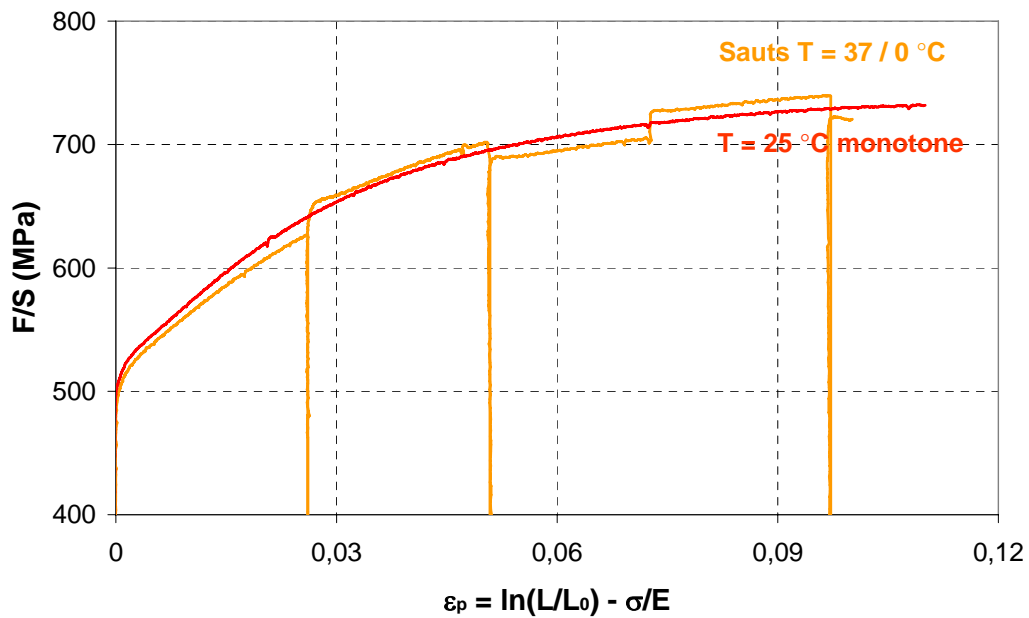
Les courbes contrainte/déformation plastique représentant les sauts de température entre  $-150$  et  $-196^{\circ}\text{C}$  sont données pour les deux matériaux (figures III.20 et III.21) avec, à titre de comparaison, les courbes monotones aux deux températures.



**Fig. III.20 :** Courbes de sauts de température  $F/S = f(\varepsilon_{peq})$  superposées avec les courbes de traction monotones à  $-196^{\circ}\text{C}$  et  $-150^{\circ}\text{C}$  (bainite)

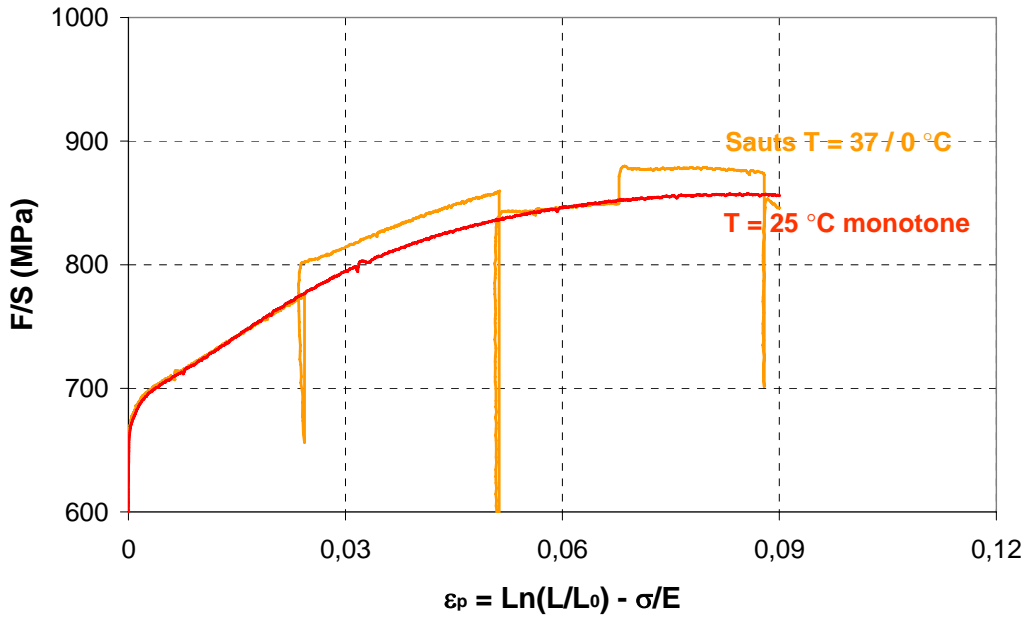


**Fig. III.21 :** Courbes de sauts de température  $F/S = f(\varepsilon_{peq})$  superposées avec les courbes de traction monotones à  $-196^{\circ}\text{C}$  et  $-150^{\circ}\text{C}$  (martensite)



**Fig. III.22 :** Courbes de sauts de température  $F/S = f(\varepsilon_{peq})$  superposées avec la courbe de traction monotone à  $25^{\circ}\text{C}$  (bainite)





**Fig. III.23 :** Courbes de sauts de température  $F/S = f(\varepsilon_{peq})$  superposées avec la courbe de traction monotone à 25°C (martensite)

L'amplitude des sauts de contrainte est assez peu dépendante du niveau de déformation ainsi que de la microstructure, ce qui était déjà le cas pour les essais de sauts de vitesse. L'écart entre les valeurs de contrainte obtenues sur les essais de température et les essais monotones reste toujours assez faible, avec cependant un léger décalage de l'ordre de 20 MPa au maximum. Il peut s'agir d'un effet d'hétérogénéité microstructurale du matériau qui joue sur la limite d'élasticité. En revanche, nous n'avons pas d'interprétation particulière à donner aux fluctuations des valeurs de  $\Delta\sigma$  au cours d'un essai.

### c) Mesure de l'énergie d'activation apparente $\Delta G$

L'intérêt de ce genre d'essais, couplés à des mesures de sauts de vitesse, est de pouvoir calculer l'énergie d'activation à partir des valeurs de  $\Delta\sigma$ .

Il est possible d'accéder à une valeur approchée de  $\Delta G$  à partir des données expérimentales dont nous disposons. Si on réalise un saut de température entre  $T_1$  et  $T_2$ , ( $T_2 < T_1$ ), la loi d'écoulement activée thermiquement s'écrit respectivement à  $T_1$  et  $T_2$  :

$$\dot{\varepsilon} = \dot{\varepsilon}_0 \exp\left[\frac{-\Delta G(\sigma_{eff}(T_1))}{kT_1}\right] \quad \text{et} \quad \dot{\varepsilon} = \dot{\varepsilon}_0 \exp\left[\frac{-\Delta G(\sigma_{eff}(T_2))}{kT_2}\right] \quad (\text{III.14})$$

Lors du saut, la vitesse de déformation reste inchangée, ce qui permet d'écrire :

$$\frac{\Delta G(\sigma_{eff}(T_1))}{T_1} = \frac{\Delta G(\sigma_{eff}(T_2))}{T_2} \quad (\text{III.15})$$

Il reste à exprimer le terme  $\Delta G(T_1)$  en fonction de  $\Delta G(\sigma_{eff}(T_2))$ . La dérivée partielle de l'énergie d'activation par rapport à la température s'écrit :

$$\frac{\partial \Delta G}{\partial T} = \frac{\partial \Delta G}{\partial \sigma_{eff}} \bigg|_T \frac{\partial \sigma_{eff}}{\partial T} \bigg|_{\dot{\epsilon}} = -V^*(T) \frac{\partial \sigma_{eff}}{\partial T} \bigg|_{\dot{\epsilon}} \quad (\text{III.16})$$

En effectuant un développement limité de  $\Delta G$  autour de  $T \approx T_1$ , on montre que :

$$\Delta G(T_2) \approx \Delta G(T_1) - V^*(T_1) \Delta \sigma_{eff} \quad (\text{III.17})$$

D'où l'équation :

$$\frac{\Delta G(T_1)}{T_1} = \frac{\Delta G(T_1) - V^*(T_1) \Delta \sigma_{eff}}{T_2} \quad (\text{III.18})$$

Ce qui conduit à l'expression de l'énergie d'activation à la température  $T_1$  :

$$\Delta G(T_1) = \frac{T_1 V^*(T_1) \Delta \sigma_{eff}}{T_1 - T_2} \quad (\text{III.19})$$

Finalement, en reprenant l'expression de  $V^*(T_1)$ , on obtient une équation du type :

$$\Delta G = kT_1^2 \left( \frac{\Delta \ln \dot{\epsilon}}{\Delta \sigma} \right) \bigg|_T \left( \frac{\Delta \sigma}{\Delta T} \right) \bigg|_{\dot{\epsilon}} \quad (\text{III.20})$$

Pour une température donnée, cette expression permet de calculer l'énergie d'activation à partir des mesures de sauts de vitesse et de sauts de température. Ainsi on peut estimer l'ordre de grandeur de  $\Delta G$  à -150 °C ainsi qu'à 25 °C dans le régime athermique (il faut néanmoins préciser que les sauts de température ont été réalisés entre 0°C et 37°C contre 25 °C pour les sauts de vitesse). Les valeurs de  $\Delta G$  données dans le tableau III.5 correspondent à la moyenne des 4 sauts de vitesse et de température (2,5, 5, 7,5 et 10 % de déformation) pour une température donnée.

Température (°C)	$\Delta G$ (eV)	
	Bainite	Martensite
25	1,01	1,17
-150	0,41	0,44

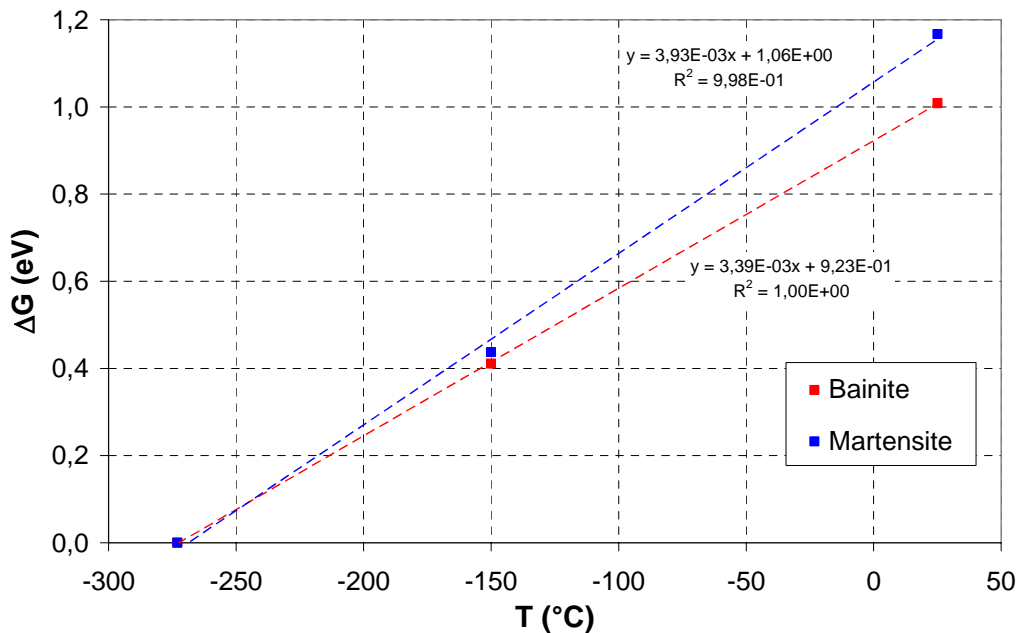
**Tableau III.5 :** Comparaison des valeurs de  $\Delta G$  obtenues à 25°C et -150 °C dans la bainite et dans la martensite

De même que pour les valeurs de  $V^*$ , les énergies d'activation obtenues sont très comparables entre bainite et martensite, ce qui suggère là encore que les mécanismes d'activation thermique semblent assez peu affectés par les différences de microstructure et de répartition

des précipités. Le formalisme de la loi d'écoulement activée thermiquement implique que, si on fixe la vitesse de déformation, la dépendance de  $\Delta G$  en fonction de la température est linéaire :

$$\Delta G = CkT \quad \text{avec} \quad C = \ln\left(\frac{\dot{\varepsilon}_0}{\dot{\varepsilon}}\right) \quad (\text{III.21})$$

L'allure des courbes  $\Delta G$  en fonction de la température nous permet de vérifier la validité de cette dépendance linéaire dans la bainite et dans la martensite (figure III.24). Nous disposons cependant de peu de valeurs expérimentales de  $\Delta G$ .



**Fig. III.24 :** Evolution de  $\Delta G$  en fonction de  $T$  / comparaison avec la loi du type  $\Delta G = CkT$

D'autre part, la valeur de  $\Delta G$  à  $T = T_a$  doit par définition correspondre à  $\Delta G_0$ , puisque à cette température le franchissement des obstacles se fait à contrainte effective nulle. Si on admet que la température de transition de comportement  $T_a$  est de l'ordre de l'ambiante, cela devrait conduire à des valeurs de  $\Delta G_0$  de l'ordre de 1 eV pour les 2 microstructures. Ces valeurs sont globalement en accord avec celles admises pour le mécanisme de double décrochement dans les métaux de structure cubique centrée (Kocks [KOC75], Astié, Peyrade & Groh [AST81], Nemat-Nasser [NEM98], Tang, Kubin & Canova [TAN98]).

### III.D Caractérisation de la transition ductile / fragile

L'objectif de ces essais est de caractériser les propriétés de ténacité de l'acier de cuve A508 C13 pour les deux microstructures et leur évolution en fonction de la température dans le domaine de la transition ductile / fragile.

### III.D.1 Procédure expérimentale / mesure de la ténacité

#### a) Eprouvettes et conditions expérimentales

Les éprouvettes utilisées pour ces essais sont de type CT 12.5. L'entaille initiale  $a_e$  avant pré-fissuration mesure 11,25 mm, l'épaisseur vaut  $B = 12,5$  mm, tandis que la largeur  $W$  (à compter du point d'application de la force) est égale à 25 mm. (figure III.25) :

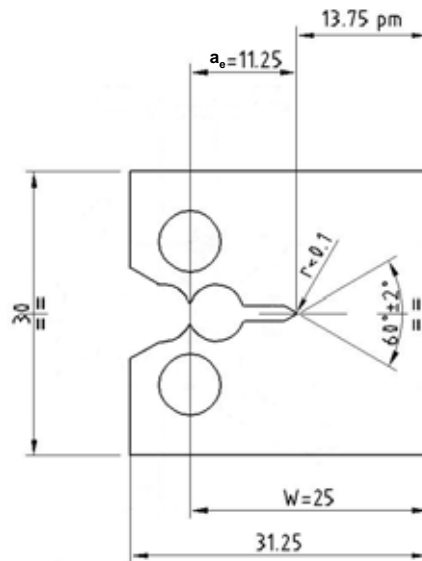


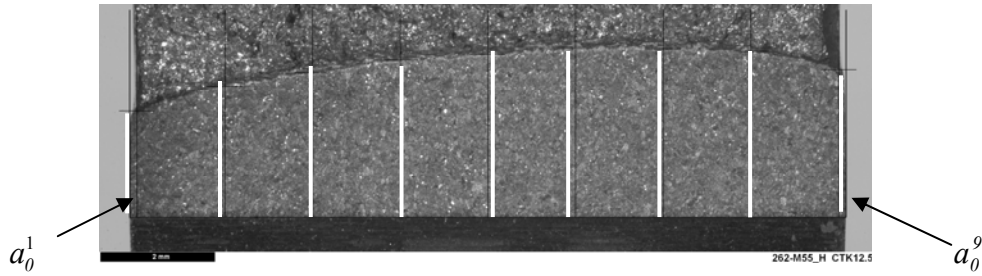
Fig. III.25 : Géométrie des éprouvettes CT 12,5

Les éprouvettes ont été pré-fissurées par fatigue sur la machine INSTRON 250 kN afin d'obtenir une longueur initiale de fissure  $a_0 = 13,75$  mm, ce qui correspond à un rapport  $a_0 / W \approx 0,55$ .

Les essais de ténacité ont été réalisés dans une enceinte régulée en température par l'intermédiaire d'un circuit d'azote liquide (cf **annexe C**). Les éprouvettes sont pourvues d'un thermocouple K (alumel/chromel) sur la face supérieure. La campagne d'essais a été réalisée à différentes températures sur les deux nuances bainitique et martensitique :  $-120\text{ C} / -90\text{ C} / -60\text{ C}$  pour la bainite et  $-142\text{ C} / -120\text{ C} / -105\text{ C} / -90\text{ C}$  pour la martensite.

#### b) Mesure de la longueur de fissure initiale $a_0$

Le dépouillement des essais requiert une mesure précise de la longueur de fissure initiale  $a_0$ . Cette mesure est réalisée post mortem sur les faciès de rupture de chacune des éprouvettes. La norme ASTM E1921 [AST98] prévoit le calcul d'une valeur moyenne de  $a_0$  qui est fonction de la distance séparant le front de pré-fissuration du front d'entaille initial à 9 endroits distincts (surface, 1/4 d'épaisseur, 1/2 épaisseur, etc.). Le traitement est effectué à partir d'une image numérisée du faciès. En général, le contraste entre la zone pré-fissurée et celle rompue fait clairement ressortir la position du front de pré-fissuration (figure III.26).



**Fig. III.26** : Méthode de mesure de la longueur initiale de fissure  $a_0$

La valeur moyenne de  $a_0$  est calculée à partir de ces 9 valeurs par la formule :

$$a_0 = \frac{I}{8} \left[ \frac{a_0^1 + a_0^9}{2} + \sum_{i=2}^8 a_0^i \right] \quad (\text{III.22})$$

Les valeurs de  $a_0$  sont données dans l'**annexe C.1** Pour vérifier l'hypothèse de plasticité confinée, la valeur de  $a_0$ , qui doit satisfaire les conditions suivantes :

$$0,45 \leq \frac{a_0}{W} \leq 0,70 \quad \text{et} \quad a_0 - a_e \geq 1,3 \text{ mm} \quad (\text{III.23})$$

$$\text{Min}_{i=0,9}(a_0^i) \geq 0,9 a_0 \quad \text{et} \quad \text{Max}_{i=0,9}(a_0^i) \leq 1,1 a_0 \quad (\text{III.24})$$

Toutes les éprouvettes testées ont vérifié les conditions (III.23) et (III.24).

### III.D.2 Résultats

#### a) Courbes force / ouverture

La force exercée sur l'éprouvette est mesurée avec une cellule d'effort de 50 kN (les valeurs de force maximum  $F_{max}$  à rupture peuvent varier de 10 à 30 kN sur l'ensemble du domaine de températures exploré), tandis que l'ouverture de la fissure est mesurée à l'aide d'un extensomètre INSTRON préalablement étalonné dans un domaine allant de 0 à 3 mm d'ouverture avec une erreur inférieure à 1%.

Pour chaque éprouvette, la courbe force déplacement est enregistrée jusqu'à rupture (cf. **annexe C.1**). Nous constatons une bonne superposition des courbes, avec toutefois des valeurs de  $\delta$  à rupture très variables d'une éprouvette à l'autre. En effet, pour une température donnée, les éprouvettes présentent une déformation plastique à rupture plus ou moins prononcée. Ceci correspond à une forte dispersion des valeurs d'énergie à rupture. Il convient donc de mesurer la ténacité en introduisant un facteur de correction lié à la dissipation d'énergie lors de la plastification de l'éprouvette. Pour mesurer la ténacité, il conviendra donc d'introduire un facteur de correction lié à la dissipation d'énergie lors de la plastification de l'éprouvette.

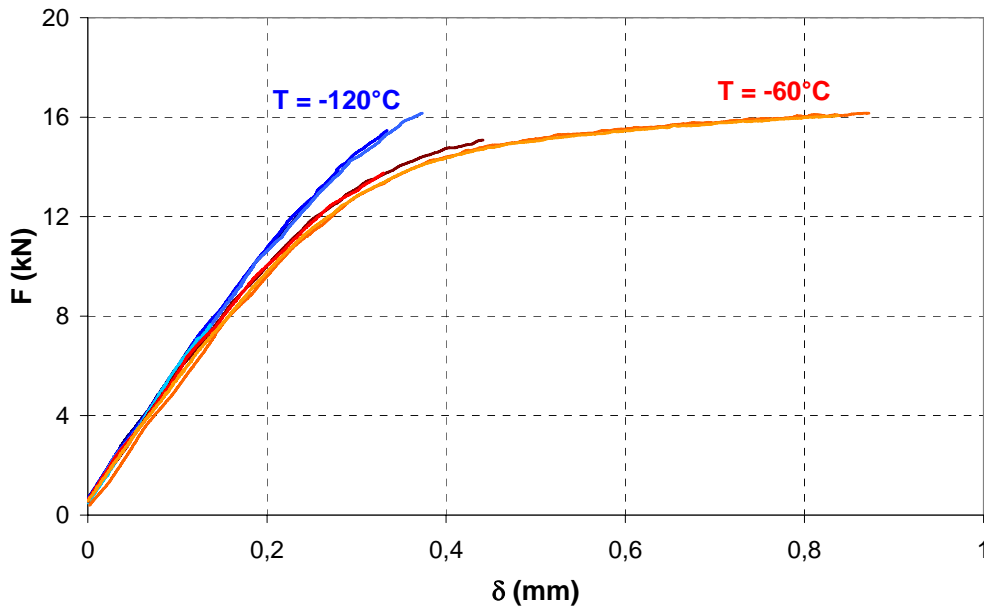


Fig. III.27 : Courbes  $F = f(\delta)$  obtenues dans la bainite à  $T = -60^\circ\text{C}$  et  $T = -120^\circ\text{C}$

### b) Calcul de la ténacité $K_{JC}$

La mesure de la ténacité  $K_{JC}$  se fait à partir de l'intégrale  $J$ , qui se compose de 2 contributions élastique et plastique :

$$J = J_e + J_p \quad (\text{III.25})$$

En élasticité, l'intégrale  $J$  est égale au taux de restitution d'énergie  $G$  pour une avancée infinitésimale de la fissure ; elle peut donc être reliée au facteur d'intensité des contraintes critique  $K_e$  :

$$J_e \approx G = \frac{K_e^2}{E} \quad (\text{III.26})$$

Pour une géométrie d'éprouvette CT normalisée, la norme ASTM E 1921 donne la valeur de  $K_e$  en fonction des dimensions  $B$  et  $W$ , du coefficient d'intensité des contraintes  $g(a_0/W)$ , et de l'effort maximal à rupture  $F_c$  :

$$K_e = \frac{F_c}{(B^2W)^{1/2}} g\left(\frac{a_0}{W}\right) \quad (\text{III.27})$$

Le coefficient d'intensité des contraintes  $g(a_0/W)$  vaut :

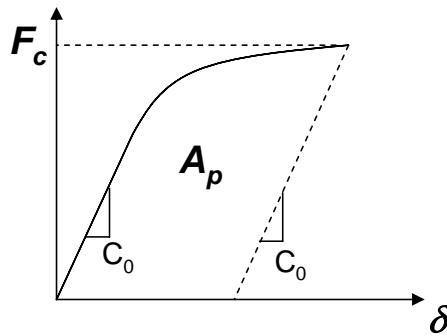
$$g\left(\frac{a_0}{W}\right) = \frac{2 + a_0/W}{(1 - a_0/W)^{3/2}} \left[ 0,886 + 4,64(a_0/W) - 13,32(a_0/W)^2 + 14,72(a_0/W)^3 - 5,6(a_0/W)^4 \right] \quad (\text{III.28})$$

Lorsque la propagation de fissure en cours d'essai n'excède pas  $\Delta a = 0,05 (W - a_0)$ , il est possible de calculer la contribution plastique  $J_p$  de l'intégrale de Rice :

$$J_p = \frac{\eta A_p}{B(W - a_0)} \quad (\text{III.29})$$

$\eta$  désigne un coefficient fixé à  $\eta = 2 + 0,522 (1 - a_0 / W)$  et  $A_p$  définit la composante plastique de l'aire sous la courbe  $F$  (effort) /  $\delta$  (ouverture du capteur), comme indiqué sur la figure III.28 :  $A_p$  se déduit de l'aire totale en retranchant la partie élastique calculée à partir de la souplesse  $C_0$  définie par  $\delta = F C_0$  :

$$A_p = A - A_e \quad \text{avec} \quad A_e = \frac{C_0 F_c^2}{2} \quad (\text{III.30})$$



**Fig. III.28 :** Calcul de l'aire plastique  $A_p$  sous la courbe  $F = f(\delta)$

Finalement, la valeur du module de ténacité  $K_{JC}$  se déduit de l'intégrale  $J$  'totale' par la relation (en considérant toujours que  $J \approx G$ ) :

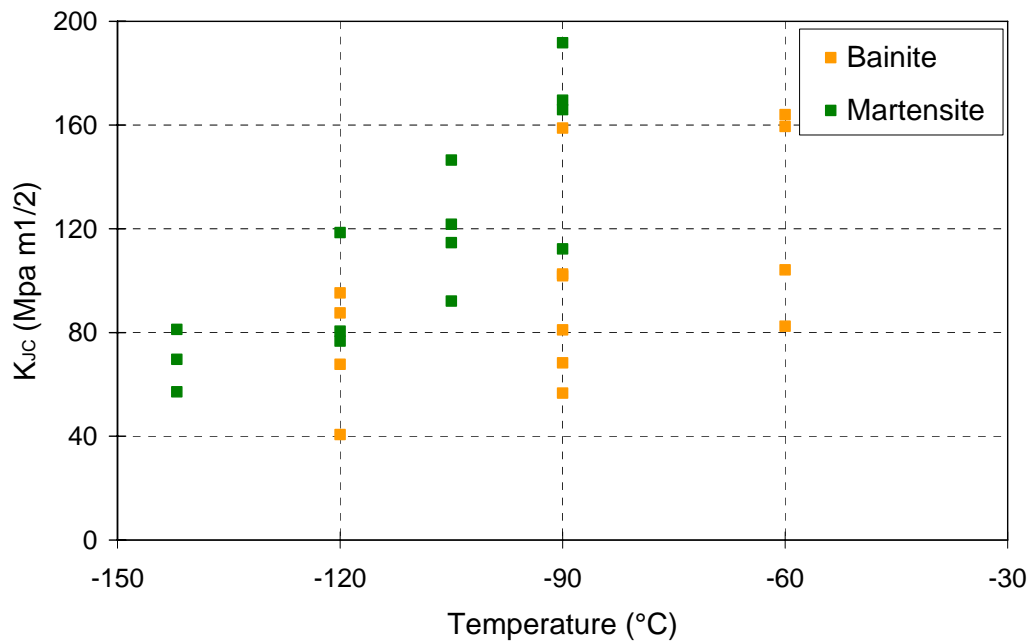
$$K_{JC} = \sqrt{E J} \quad (\text{III.31})$$

### c) Evolution de $K_{JC}$ en fonction de $T$ dans la bainite et la martensite

Nous disposons de 28 éprouvettes CT 12,5 :

- **14 essais ont été réalisés dans la bainite** : 4 essais à  $-60^\circ\text{C}$ , 6 essais à  $-90^\circ\text{C}$ , 4 essais à  $-120^\circ\text{C}$  ;
- **14 essais ont été réalisés dans la martensite** : 4 essais à  $-90^\circ\text{C}$ , 4 essais à  $-105^\circ\text{C}$ , 3 essais à  $-120^\circ\text{C}$  et 3 essais à  $-142^\circ\text{C}$ .

L'évolution des valeurs de  $K_{JC}$  est donnée en fonction de la température sur la figure III.29.



**Fig. III.29** : Evolution des valeurs de  $K_{JC}$  dans la bainite et la martensite

D'une part, on constate que les valeurs de  $K_{JC}$  augmentent avec la température, aussi bien pour la bainite que pour la martensite. En effet, les courbes force / ouverture montrent que la force critique à rupture  $F_c$  est atteinte au prix d'une déformation plastique préalable d'autant plus grande que la température est élevée. Ce raisonnement est également transposable à l'échelle microscopique : l'amorçage du clivage s'accompagne d'une déformation plastique préalable faible à  $T = -196^\circ\text{C}$ , mais très élevée à  $T = -60^\circ\text{C}$  [TAN05].

De plus, il apparaît que les dispersions de valeurs de  $K_{JC}$  sont d'autant plus grandes que  $T$  est élevée. Cet effet est observé pour les deux microstructures, mais semble encore plus prononcé dans la bainite que dans la martensite. Ce phénomène est bien décrit dans la littérature [WAL84] [WAL02] [HAU05], mais les causes de cet accroissement de la dispersion sont multiples et mal identifiées. On peut invoquer l'augmentation des hétérogénéités des champs mécaniques locaux avec la déformation en fond de fissure : à l'échelle de l'éprouvette, cela se traduirait par une augmentation des hétérogénéités de valeurs de  $K_{JC}$ .

A température fixée, on observe que les valeurs de  $K_{JC}$  sont en moyenne plus élevées dans la martensite que dans la bainite. Si on considère que la rupture par clivage s'amorce principalement sur les carbures [WST84] [HAH84] [LEE02], cet effet de microstructure peut s'expliquer assez simplement par une taille des carbures plus faible dans la martensite que dans la bainite. Il faudrait donc fournir une contrainte plus élevée pour amorcer le clivage dans la martensite.

D'autre part, les barrières microstructurales peuvent également freiner la propagation du clivage [BRO78] [ZHA99] : les paquets de lattes sont plus fins dans la martensite, ce qui rendrait plus difficile la propagation des germes de clivage.



### III.D.3 Comparaison avec une approche *Master Curve*

Dans cette partie, les dispersions expérimentales de  $K_{JC}$  sont comparées avec celles obtenues par l'approche *Master Curve*. Cette méthode est basée sur les mécanismes physiques de la rupture fragile par clivage. Elle permet de prédire de manière assez satisfaisante l'évolution des valeurs de ténacité en fonction de  $T$  pour différents aciers faiblement alliés. D'autre part, le calage de la dépendance de  $K_{JC}$  requiert l'identification d'un seul paramètre  $T_0$ .

#### a) Fondements de l'approche *Master Curve*

S'inspirant du modèle WST [WST84], Wallin a proposé une modélisation de la dispersion des valeurs de ténacité dans un cadre général : l'approche *Master Curve* [WAL84]. Il montre que la probabilité de rupture fragile dans un volume macroscopique  $V$  peut être exprimée comme fonction de  $K_I$ .

Wallin considère un volume élémentaire  $V_0$  contenant une distribution de  $N$  sites d'amorçage possibles du clivage. Pour un niveau de chargement donné, chacun de ces sites a une probabilité  $P_i(a > a_c)$  de devenir critique. Si on considère qu'il suffit d'activer un des sites d'amorçage pour rompre le volume  $V$ , la probabilité de survie s'écrit :

$$P_{NR}(V_0) = \prod_{i=1}^N (1 - P_i(a \geq a_c)) \quad (\text{III.32})$$

En supposant que  $V_0$  est assez petit pour que tous les sites voient le même chargement, l'équation (III.32) devient :

$$P_{NR}(V_0) = (1 - P_i(a \geq a_c))^N \quad (\text{III.33})$$

En introduisant la densité volumique de sites  $N_v = N/V_0$ , l'équation (III.33) s'écrit :

$$P_{NR}(V_0) = \exp \left[ V_0 \text{Ln} \left( (1 - P_i(a \geq a_c))^{N_v} \right) \right] \quad (\text{III.34})$$

Pour calculer la probabilité de rupture  $P_R(V)$  dans le volume  $V$ , Wallin fait l'hypothèse du maillon le plus faible : il suffit de casser un des maillons de volume  $V_0$  pour arriver à la rupture du volume  $V = nV_0$ . Le terme  $P_R(V)$  s'exprime :

$$P_R(V) = 1 - \prod_{k=1}^n (P_{nr}^k(V_0)) \quad (\text{III.35})$$

Si la densité volumique de sites  $N_v$  est identique dans chaque maillon,  $P_R(V)$  s'écrit :

$$P_R(V) = 1 - \exp \sum_{k=1}^n \left[ V_0 \text{Ln} \left( (1 - P_k(a \geq a_c))^{N_v} \right) \right] \quad (\text{III.36})$$

Par la suite, Wallin considère que les sites potentiels d'amorçage sont répartis suivant une distribution de Poisson. En assimilant le volume élémentaire  $V_0$  à  $dV$ , il montre que la probabilité de rupture du maillon se met sous la forme intégrale :

$$P_R(V) = 1 - \exp \left[ -N_v \int_V P(a \geq a_c) dV \right] \quad (\text{III.37})$$

En supposant que l'amorçage des micro défauts ne peut se produire que sous l'effet des mécanismes de plasticité, le volume  $V$  peut être assimilé à la zone plastique de taille  $V_p$ . Le terme  $P(a \geq a_c)$  dépend du champ de contraintes dans la zone plastique qui est lui-même dépendant de  $r$  en coordonnées cylindriques. Wallin suppose que le champ mécanique en pointe de fissure est de la forme de la solution H.R.R. [HUT68], ce qui lui permet d'exprimer l'équation (III.37) directement en fonction de  $K_I$  :

$$P_R(K_I) = 1 - \exp[-\lambda B K_I^4] \quad (\text{III.38})$$

$\lambda$  définit une constante. A noter que l'exposant 4 est une conséquence du champ H.R.R. en pointe de fissure. Cette hypothèse est valide lorsque la zone plastique est confinée. Wallin préfère introduire une valeur  $K_0$  correspondant à une valeur de ténacité pour une probabilité de rupture de  $1 - e^{-1}$ , c'est-à-dire environ 63 % :

$$P_R(K_I) = 1 - \exp \left[ - \left( \frac{K_I}{K_0} \right)^4 \right] \quad (\text{III.39})$$

Dans cette description, il n'existe pas de valeur limite de ténacité en dessous de laquelle il n'y a jamais de rupture. En réalité, la fissure ne peut pas se propager sans l'apport d'énergie nécessaire au franchissement des joints de lattes et joints de grains ainsi qu'à la plastification même locale. Par conséquent, dans l'approche *Master Curve*, un seuil de ténacité minimale  $K_{min}$  est introduit :

$$P_R(K_I) = 1 - \exp \left[ - \left( \frac{|K_I - K_{min}|}{K_0 - K_{min}} \right)^4 \right] \quad \text{lorsque } |K_I| > K_{min} \quad (\text{III.40})$$

$$P_R(K_I) = 0 \quad \text{sinon} \quad (\text{III.41})$$

Dans l'approche *Master Curve*, c'est cette dernière forme de l'expression de  $P_R(K_I)$  qui est utilisée pour décrire les dispersions de valeurs de  $K_{JC}$ . En pratique, des études statistiques menées sur des aciers de cuve de type A508 C13 ont montré qu'une valeur de  $K_{min} = 20$  MPa était appropriée à l'application de la *Master Curve* [WAL84].

### b) Définition de la *Master Curve*

L'équation (III.40) nous donne la probabilité de rupture pour une valeur de  $K_I$  fixée. Inversement, pour une probabilité de rupture donnée (par exemple  $P_r(K_{JC}) = 0,5$ ), cette équation permet de prédire une valeur de ténacité 'médiane' de l'éprouvette  $K_{JC}(50\%)$ . La *Master Curve* est la courbe qui donne l'évolution de  $K_{JC}(50\%)$  en fonction de la température  $T$ . Si on introduit  $P_r(K_{JC}) = 0,5$  dans l'équation (III.40), on peut exprimer  $K_{JC}(50\%)$  en fonction de  $K_0$  et  $K_{min}$  :

$$K_{JC}(50\%) = (K_0 - K_{min}) [\ln(2)]^{1/4} + K_{min} \quad (III.42)$$

La dépendance en température est introduite via le terme  $K_0$  : Wallin montre que  $K_0$  dépend de la limite d'élasticité  $R_p^{0,2}$ . Il introduit une loi empirique de la forme :

$$K_0 = c_1 + c_2 \exp[0,019(T - T_0)] \quad (III.43)$$

Les paramètres  $c_1$  et  $c_2$  sont fixés respectivement à 30 et 70 MPa m<sup>1/2</sup>. La constante  $T_0$  définit un température de référence :  $T_0$  est la température pour laquelle  $K_0$  est égal à 100 MPa m<sup>1/2</sup>, ou autrement dit la température à laquelle 63 % des éprouvettes rompent pour  $K_{JC} = 100$  MPa m<sup>1/2</sup>.

Il est également nécessaire de prendre en compte l'effet de la taille des éprouvettes sur la valeur de ténacité : les valeurs de ténacité sont d'autant plus faibles que les éprouvettes testées sont de grandes dimensions. En s'appuyant sur l'équation (III.38), on montre que l'effet de taille se traduit de la manière suivante sur la ténacité :

$$K_{JC_0}(50\%) = K_{min} + [K_{JC}(50\%) - K_{min}] \left( \frac{B}{B_0} \right)^{1/4} \quad (III.44)$$

$K_{JC_0}(50\%)$  définit la valeur de ténacité corrigée pour une taille d'éprouvette  $B_0$ . La norme ASTM E 1921 introduit par exemple une valeur standard de la ténacité  $K_{JC_{25}}(50\%)$  correspondant à des éprouvettes d'épaisseur  $B = 25$  mm. Par la suite la *Master Curve* est appliquée pour prédire l'évolution de  $K_{JC_{25}}(50\%)$  en fonction de  $T$ .

### c) Calage de la *Master Curve*

Le calage de la *Master Curve* consiste à ajuster l'évolution de  $K_0$  en fonction de  $T$  de manière à faire coïncider les valeurs expérimentales avec la loi d'évolution donnée par l'équation (III.42). Cet ajustement se fait via le paramètre  $T_0$ .

Pour une valeur de  $K_{JC}$ , la probabilité de rupture peut être calculée à partir des essais sur éprouvettes CT :

$$P_R(K_{JC}) = \frac{i - 0,3}{N + 0,4} \quad (III.45)$$

$i$  correspond à la  $i$ -ème valeur de  $K_{JC}$  classée par ordre croissant et  $N$  au nombre total d'éprouvettes testées à la température  $T$ . L'identification de  $T_0$  est réalisée en deux étapes :

- connaissant  $P_R(K_{JC})$ , on identifie une valeur de  $K_0$  pour chaque température d'essai à partir de l'équation (III.40) ;
- en utilisant l'équation (III.43), le paramètre  $T_0$  est recalé à partir des valeurs de  $K_0$  obtenues pour les différentes valeurs de  $T$ .

Une fois que le paramètre  $T_0$  a été identifié, la combinaison des équations (III.42), (III.43) et (III.44) permet d'exprimer l'évolution de  $K_{JC_{25}}(50\%)$  en fonction de  $T$ . Les études statistiques menées sur différents aciers montrent que l'ajustement de  $T_0$  est suffisant pour décrire l'évolution de ténacité [WAL84] [WAL02], et ce sans modifier d'autres paramètres,

ce qui montre le caractère ‘universel’ de l’approche *Master Curve*, par opposition au modèle WST [MAR04].

Il est toutefois utile de remarquer qu’il existe une valeur maximale de ténacité  $K_{JC(max)}$  au-delà de laquelle l’essai n’est pas considéré comme étant valide (hypothèse de confinement de la plasticité non vérifiée) :

$$K_{JC(max)} = \sqrt{\frac{BER_{0,2}^p}{M(1-\nu^2)}} \quad (III.46)$$

M est une constante qui vaut  $M \approx 30$ . En pratique, cette valeur limite est de l’ordre de 250 MPa m<sup>1/2</sup> dans les aciers faiblement alliés : dans le domaine de températures balayé expérimentalement ; la ténacité critique  $K_{JC(max)}$  n’est jamais atteinte.

### c) Résultats et discussion

L’approche *Master Curve* a été appliquée aux 28 éprouvettes CT12,5 testées dans les deux nuances bainitique et martensitique. La température  $T_0$  a été déterminée pour chacune des deux nuances. La *Master Curve*  $K_{JC\_25}(50\%) = f(T)$  est ensuite tracée pour une taille d’éprouvette normalisée d’épaisseur  $B = 25$  mm. Nous avons également calculé des courbes d’évolution de la ténacité  $K_{JC\_25}$  pour d’autres valeurs de probabilité de rupture  $P_R$  :

- $K_{JC\_25}(1\%)$  : ténacité à 1% de probabilité de rupture ;
- $K_{JC\_25}(5\%)$  : ténacité à 5% de probabilité de rupture ;
- $K_{JC\_25}(95\%)$  : ténacité à 95% de probabilité de rupture ;
- $K_{JC\_25}(99\%)$  : ténacité à 99% de probabilité de rupture.

Les figures III.30 et III.31 montrent une comparaison entre les dispersions de  $K_{JC}$  prédites par l’approche *Master Curve* et celles prédites expérimentalement dans la bainite et la martensite.

L’identification de la dépendance  $K_0(T)$  conduit aux valeurs de  $T_0$  suivantes : -89°C pour la bainite et -118°C pour la martensite. Cet écart entre les deux microstructures peut s’expliquer par les valeurs plus élevées de  $K_{JC}$  dans la martensite que dans la bainite.

On constate dans l’ensemble que les valeurs expérimentales de  $K_{JC}$  sont en accord avec celles prédites par l’approche *Master Curve*. On note cependant quelques désaccords entre les dispersions prédites par la *Master Curve* et celles obtenues expérimentalement :

- Dans la bainite, les dispersions expérimentales de  $K_{JC}$  sont plus élevées que celles données par l’approche *Master Curve*. A -120°C et -90°C, on constate que l’une des valeurs expérimentales de  $K_{JC}$  dépasse nettement la courbe  $K_{JC\_25}(99\%)$ .
- Dans la martensite, les dispersions expérimentales de  $K_{JC}$  restent toujours comprises dans les bornes  $K_{JC\_25}(5\%)$  et  $K_{JC\_25}(95\%)$ . Par opposition aux remarques formulées pour la bainite, il semble que l’approche *Master Curve* surestime légèrement les dispersions de  $K_{JC}$  dans la martensite.

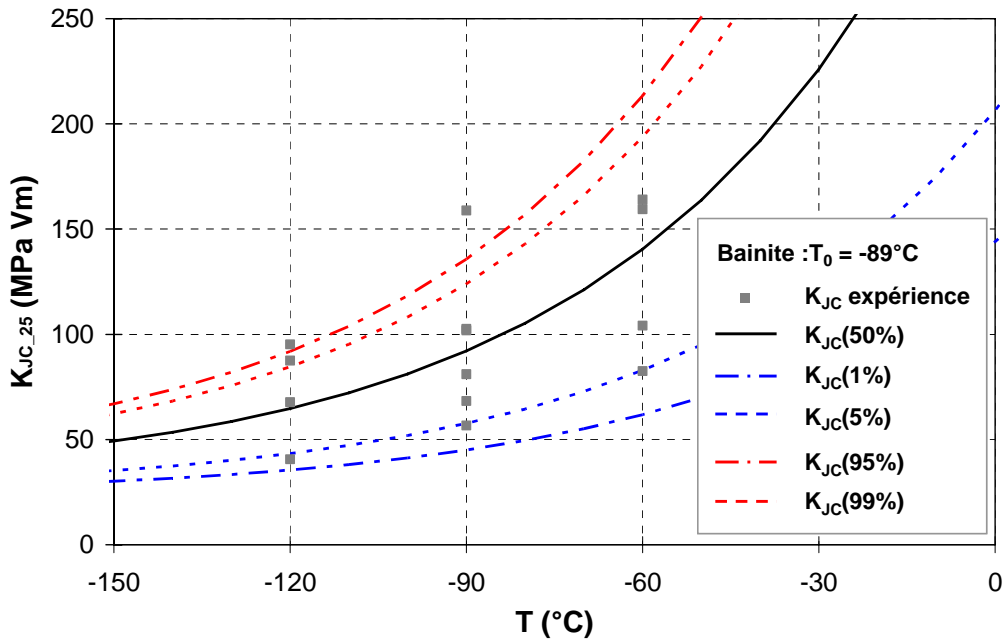


Fig. III.30 : Identification de la *Master Curve* sur les valeurs de  $K_{JC}$  mesurées dans la bainite

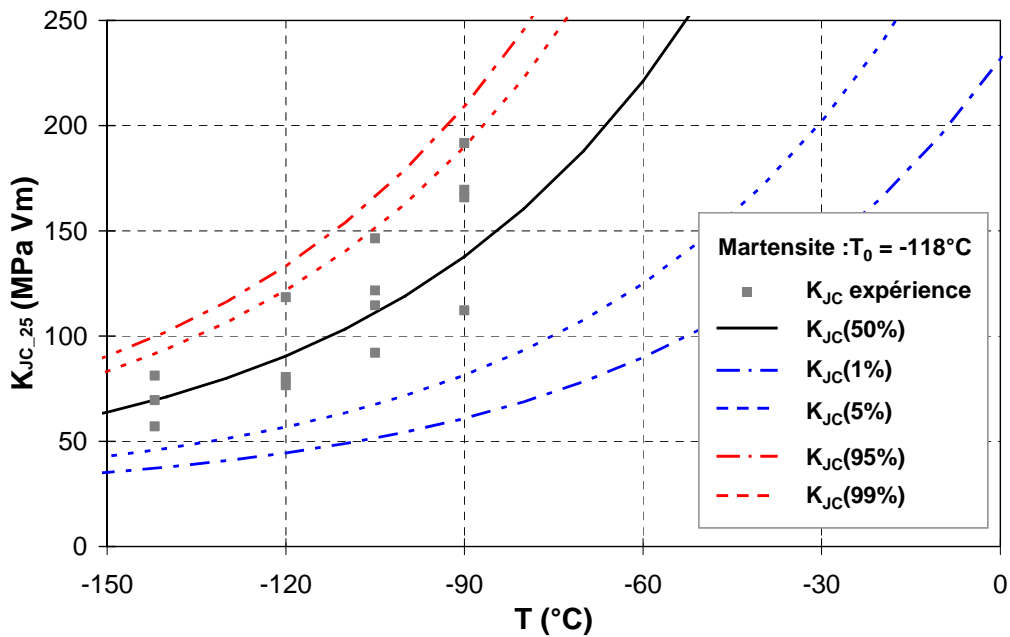


Fig. III.31 : Identification de la *Master Curve* sur les valeurs de  $K_{JC}$  mesurées dans la martensite

En définitive, les dispersions de ténacité sont plutôt en bon accord avec l'approche *Master Curve*. Ce genre d'approche ne parvient cependant pas à expliquer les différences de dispersion de  $K_{JC}$  entre les deux microstructures.

Le recalage de  $T_0$  permet uniquement de tenir compte de l'effet de la température sur la ténacité, et d'une manière très simpliste (la température n'est supposée influencer que sur la

contrainte de clivage et la limite d'élasticité). Or, l'effet de la microstructure sur la distribution des tailles de carbures peut conduire à modifier les dispersions de ténacité. On peut également suggérer l'existence d'un effet de la température sur les hétérogénéités de champs locaux. La mise en place d'un modèle d'approche locale de la rupture fragile doit absolument prendre en compte ces deux derniers aspects.

### III.E Etude fractographique

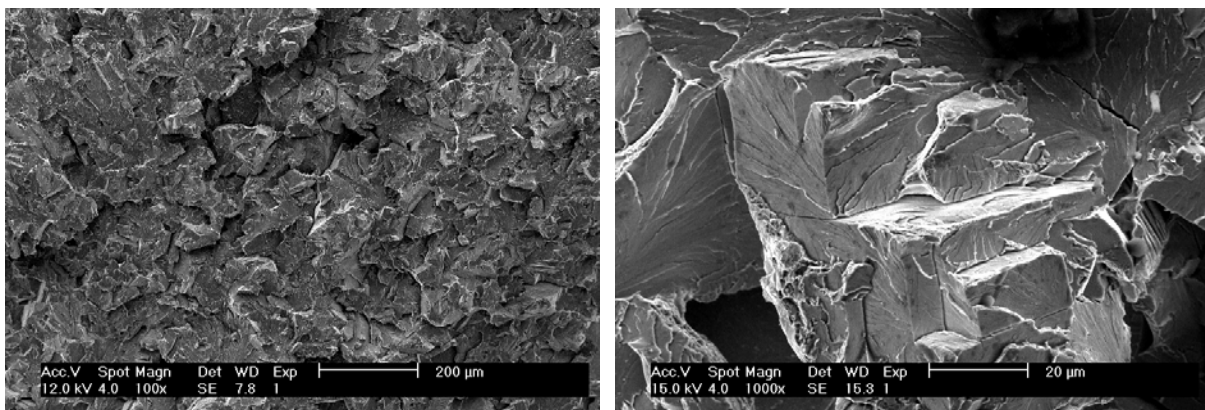
Nous disposons d'une description relativement précise de l'évolution de la ténacité en fonction de la température, tout en tenant compte de l'effet de la plasticité et ce pour les 2 microstructures étudiées (bainitique et martensitique). L'étude fractographique menée sur les éprouvettes de traction et CT vise à identifier les sites d'amorçage du clivage. L'objectif est d'établir quels sont les défauts et les mécanismes à l'origine de la rupture brutale dans la bainite et la martensite.

#### III.E.1 Eprouvettes de traction simple

Les faciès de rupture de plusieurs éprouvettes bainitique et martensitique ayant rompu à -196°C et 25°C ont été observés avec un microscope électronique à balayage (PHILIPS XL 30) en électrons secondaires.

##### a) Bainite :

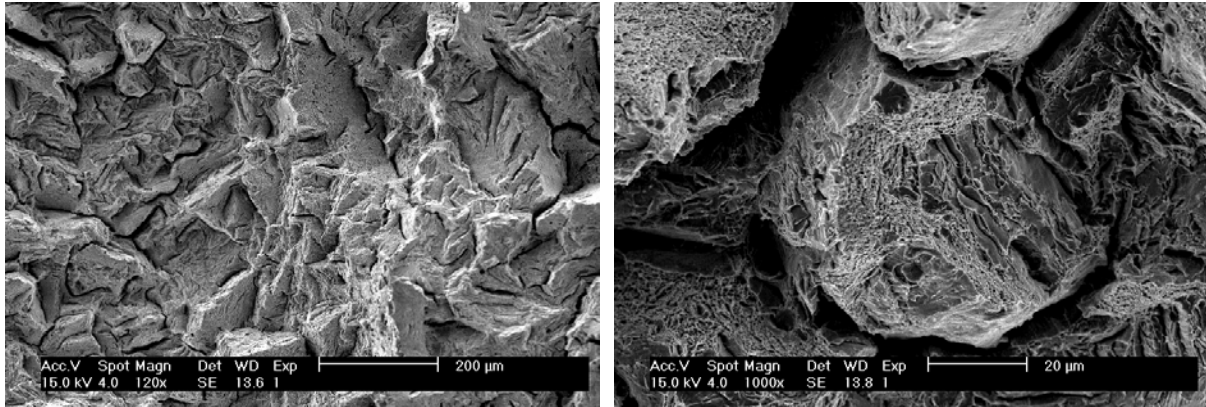
Les 2 éprouvettes observées à -196°C (R16 et R17) ont rompu de manière brutale avant striction et présentent des faciès de nature presque exclusivement fragile. On observe un ensemble de rivières caractéristiques (figure III.32.a), avec très localement quelques traces de rupture ductile par nucléation, croissance et coalescence de cupules. Les différentes facettes se découpant au premier plan (figure III.32.b) forment des parallélépipèdes, ce qui semble là encore une signature typique de différents plan de clivage de type  $\{100\}$  orientés à 90° les uns des autres.



(a) grandissement x100

(b) grandissement x1000

**Fig. III.32** : Faciès de rupture dans la bainite (Epr. R17) à  $T = -196^{\circ}\text{C}$

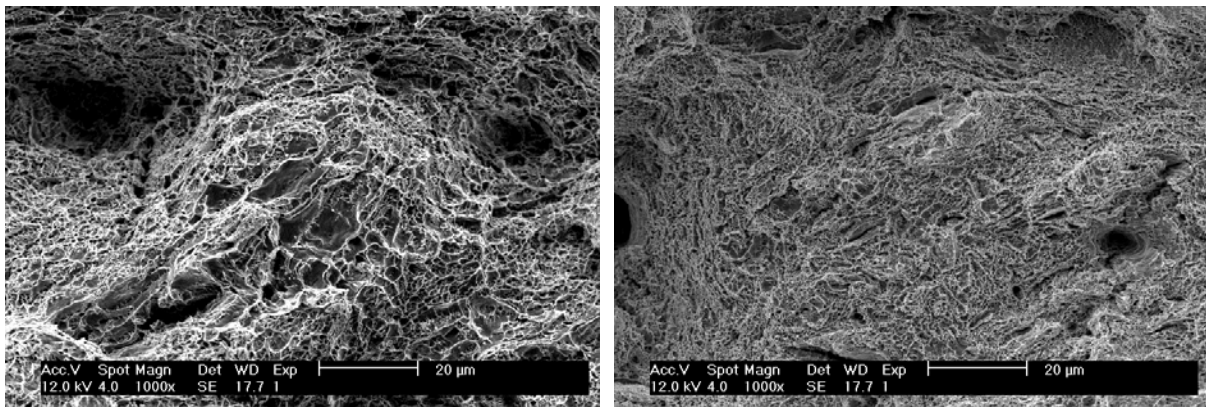


(a) grandissement x100

(b) grandissement x1000

**Fig. III.33 :** Faciès de rupture dans la martensite (Epr. M36) à  $T = -196^{\circ}\text{C}$

Les éprouvettes rompues à température ambiante présentent un faciès de déchirure en ‘cône et cratère’ caractéristique de la rupture ductile et exclusivement constitué de cupules entrecoupées de quelques ligaments déchirés en cisaillement. (cf. figure III.34.a). Les cupules formées sur la bainite ont une taille moyenne de l’ordre de 1 à 2  $\mu\text{m}$ .



(a) bainite (Epr. R17)

(b) martensite (Epr. M21)

**Fig. III.34 :** Faciès de rupture à  $T = 25^{\circ}\text{C}$  dans la bainite (a) et la martensite (b)

#### b) Martensite :

Les 2 éprouvettes martensitiques testées à  $-196^{\circ}\text{C}$  (M35 et M36), ont rompu après striction et présentent un faciès de rupture essentiellement ductile avec localement quelques facettes caractéristiques du clivage. La figure III.33.a (vue d’ensemble à faible grandissement) fait apparaître les paquets de lattes ainsi que les ex grains  $\gamma$ , généralement invisibles sur des faciès de clivage. Ce phénomène pourrait être attribué à la présence de faciès de décohésion intergranulaire, mais ces interfaces n’ont pu être observées que très localement (cf. **annexe B.1**).

Les éprouvettes rompues à température ambiante présentent un faciès de déchirure ductile exclusivement constitué de cupules entrecoupées de quelques ligaments déchirés par

cisaillement (cf. figure III.34.b). Les cupules observées à -196 et 25 °C ont une taille de l'ordre de 0,25 à 0,5 µm.

**c) Bilan :**

Les faciès de rupture sont de nature ductile, excepté sur la bainite à -196°C où l'on observe une rupture de nature purement fragile. La différence entre les faciès ductiles de la bainite et de la martensite peut être attribuée à la taille et à la dispersion des carbures qui ont une influence sur la taille des cupules. On constate également que sur la martensite à -196°C, le faciès de rupture fait apparaître des entités qui s'apparentent à des ex-grains  $\gamma$  et des paquets de lattes, ce qui n'est pas le cas pour les autres conditions expérimentales, ni sur la bainite, ni sur la martensite. Ces observations n'ont cependant pas pu être clairement associées à des phénomènes de décohésion intergranulaire.

### III.E.2 Eprouvettes CT

Les éprouvettes CT testées ont été rompues par clivage. Une étude fractographique a été entreprise afin d'identifier les sites d'amorçage du clivage ainsi que les particules à l'origine du clivage (carbures, MnS). L'étude fractographique a été réalisée avec un microscope électronique à balayage JEOL JSM 6400.

**a) Bainite :**

Les observations MEB ont été réalisées sur les éprouvettes suivantes :

- $T = -60^\circ\text{C}$  : éprouvettes N24 et N25 ;
- $T = -90^\circ\text{C}$  : éprouvettes N22 et N30 ;
- $T = -120^\circ\text{C}$  : éprouvette N27.

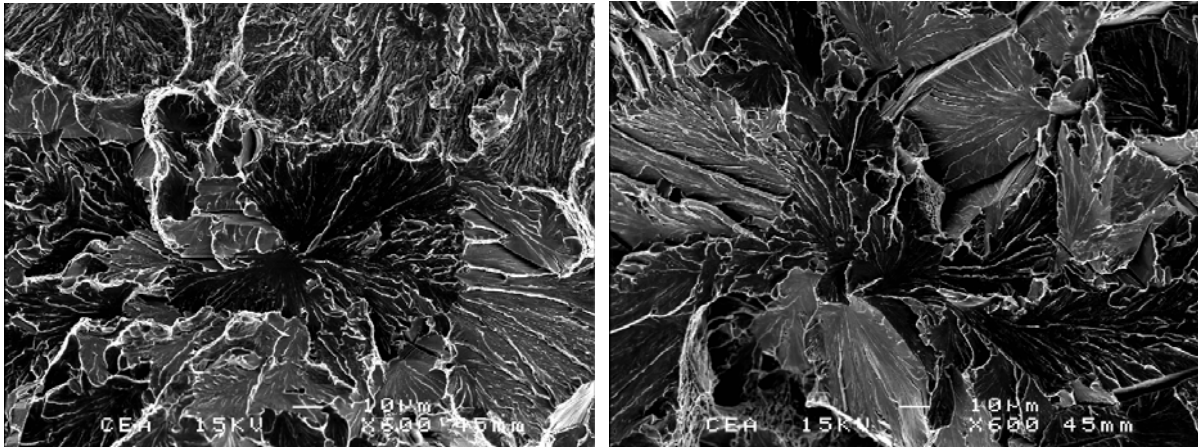
Pour les éprouvettes N25 et N27, il n'est pas possible d'identifier un site évident d'amorçage du clivage. On observe plusieurs sites d'amorçage locaux le long du front de préfissuration de l'éprouvette.

A  $T = -90^\circ\text{C}$ , les éprouvettes N22 et N30 présentent des sites d'amorçage caractérisés par la convergence des rivières de clivage vers un paquet de lattes (cf. figure III.35). On peut émettre l'hypothèse de l'amorçage du clivage à partir de carbures :

- aucune particule de MnS (aisément repérable sur les fractographies) n'est observée à proximité du site d'amorçage du clivage ;
- il n'y a pas de faciès de décohésion inter-granulaire.

Il n'est cependant pas possible d'identifier formellement l'amorçage du clivage à partir de carbures.



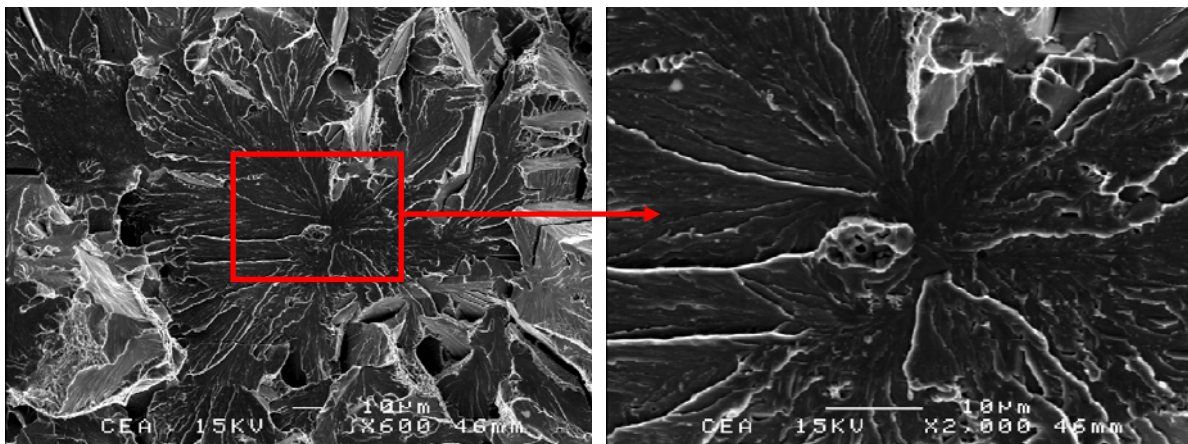


(a) Epr. N22

(b) Epr. N30

**Fig. III.35 :** Sites d'amorçage du clivage sans particule apparente dans la bainite à  $T = -90^{\circ}\text{C}$

Pour l'éprouvette N24 ( $T = -60^{\circ}\text{C}$ ), l'origine du clivage a été identifiée. Le site d'amorçage est constitué par une particule de MnS sphérique d'environ  $10\ \mu\text{m}$  de diamètre (cf. figure III.36). L'analyse chimique EDX met en évidence la présence de traces de laitier (Cu, Mg, Al) à proximité du site d'amorçage. On note que cette particule est de plus petites tailles et moins allongées que les clusters de MnS observés par Rossol [ROS98] et Renevey [REN99] dans des aciers faiblement alliés (taille  $\approx 100\ \mu\text{m}$ ). Mäntylä mentionne cependant les particules sphériques de MnS comme responsables de l'amorçage du clivage pour des températures de l'ordre de  $T = -90^{\circ}\text{C}$  [MÄN99].



(a) grandissement x600

(b) grandissement x2000

**Fig. III.36 :** Amorçage du clivage sur une particule de MnS dans la bainite (epr. N24 /  $T = -60^{\circ}\text{C}$ )

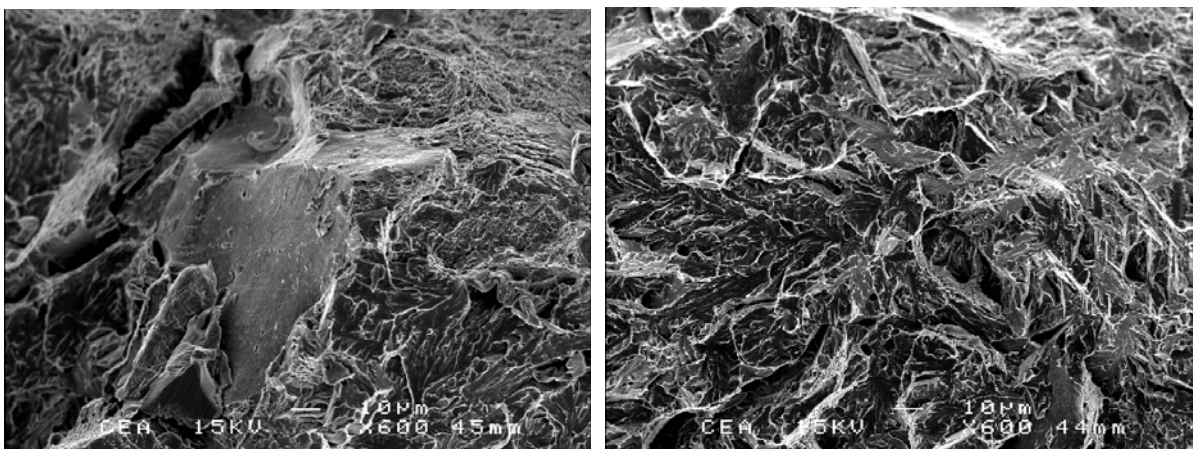
#### b) Martensite :

Les observations MEB ont été réalisées sur les éprouvettes suivantes :

- $T = -90^{\circ}\text{C}$  : éprouvettes N54 et N59 ;
- $T = -120^{\circ}\text{C}$  : éprouvette M50 ;
- $T = -142^{\circ}\text{C}$  : éprouvettes M56 et M57.

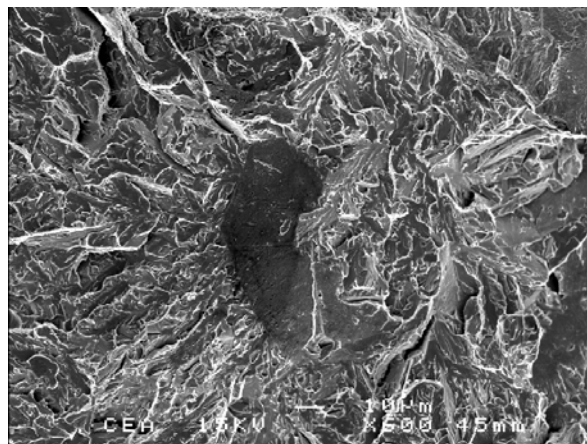
L'identification des sites est plus complexe dans la martensite que dans la bainite : les rivières de clivage sont plus fines et plus tourmentées. L'éprouvette M59 ne présente pas de site clair d'amorçage du clivage. Les éprouvettes M50, M54 et M57 présentent plusieurs sites d'amorçage du clivage : un site principal et plusieurs sites secondaires. Les sites d'amorçage supposés principaux sont présentés sur la figure III.37. Comme dans la bainite, ces sites ne font apparaître aucune particule de seconde phase. On peut émettre l'hypothèse d'une rupture amorcée sur des carbures.

Cependant, dans les éprouvettes M54 et M57, des faciès de décohésion inter-granulaire sont observés. Il est difficile de juger si ces faciès séparent des ex-grains  $\gamma$  ou des paquets de lattes. Quelques ligaments ductiles sont observés à proximité du site d'amorçage de l'éprouvette M50.



(a) Epr. M54 ( $T = -90^{\circ}\text{C}$ )

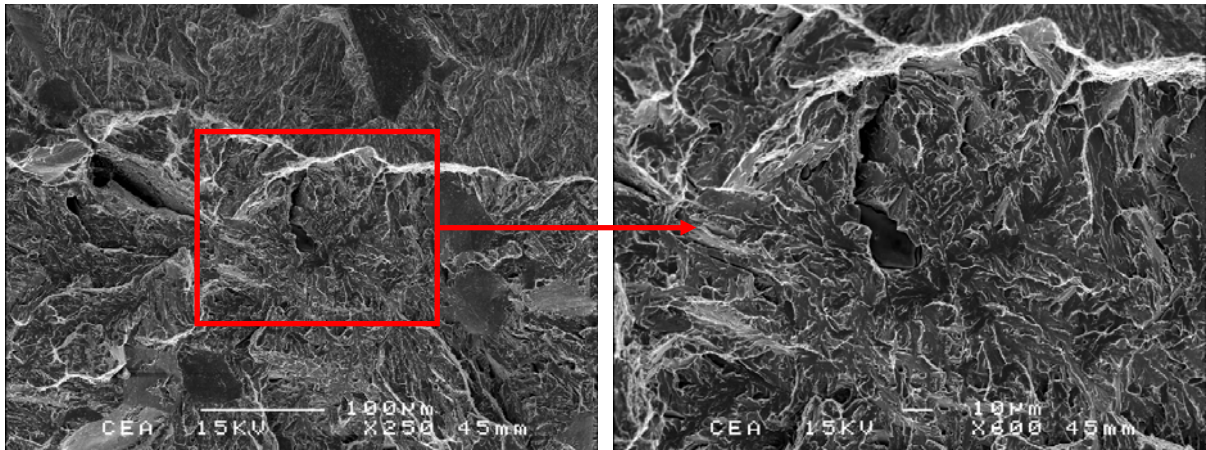
(b) Epr. M50 ( $T = -120^{\circ}\text{C}$ )



(c) Epr. M57 ( $T = -142^{\circ}\text{C}$ )

**Fig. III.37** : Sites d'amorçage du clivage dans la martensite sans présence de particules

Dans l'éprouvette M56, le site d'amorçage de la rupture est facilement identifiable : il s'agit d'un sulfure de MnS de taille 20 à 30  $\mu\text{m}$  (figure III.38).



**Fig. III.38** : Site d'amorçage du clivage sur un amas de MnS dans la martensite ( $T = -142^{\circ}\text{C}$ )

**c) Bilan :**

Les observations ont permis d'identifier le site d'amorçage du clivage pour six des dix éprouvettes observées. Dans leur majorité, les sites ne présentent aucune particule de seconde phase visible.

Dans la martensite, on observe des faciès de décohésion intergranulaire, à proximité du site d'amorçage de 2 des éprouvettes observées. Il n'est pas possible de dire si cette décohésion est la cause du clivage ou une conséquence.

Enfin, dans deux des éprouvettes, la rupture est initiée sur des particules de MnS.

En conclusion, on peut formuler les remarques suivantes :

- Les carbures ne peuvent être tenus pour seuls responsables de l'amorçage de la rupture par clivage : le clivage est amorcé sur des particules de MnS dans seulement deux des éprouvettes observées. Ce cas de figure ne semble toutefois pas représentatif de l'ensemble des éprouvettes.
- Pour la plupart des éprouvettes (huit sur dix), l'identification des défauts à l'origine du clivage est problématique. Le site d'amorçage n'est pas toujours évident à localiser, et on n'observe pas de défaut apparent à l'origine du clivage. Les observations ne sont pas incompatibles avec l'hypothèse d'un amorçage de la rupture fragile sur les carbures.

## Conclusion du chapitre III

- Elaboration et caractérisation microstructurale : les deux microstructures bainitique et martensitique, élaborées par trempe, ont été caractérisées en analyse EBSD et au microscope électronique en transmission (MET). L'étude EBSD met en évidence l'existence d'une taille de domaine EBSD cristallographiquement représentative au-delà de laquelle les dispersions des indices de texture  $J$  et de MacKenzie  $M$  deviennent peu significatives. D'autre part, les clichés MET ont permis d'estimer la densité de dislocations initiale à environ  $10^{14} \text{ m}^{-2}$  pour la bainite et la martensite. Dans le cadre de la modélisation micromécanique de la bainite (**chapitre V**), ces résultats sont utilisés pour déterminer une taille de microstructure cristallographiquement représentative.
- Caractérisation de l'érouissage monotone : Les essais de traction simple montrent un fort effet de la température sur la limite d'élasticité en traction  $R^p_{0,2}$ . La martensite présente des valeurs de  $R^p_{0,2}$  plus élevées que la bainite. Ces remarques peuvent être expliquées respectivement par la nature activée thermiquement du comportement et par un effet de type 'Hall-Petch'. Le module d'érouissage  $\theta$  est clairement une fonction décroissante de la température, aussi bien pour la bainite que pour la martensite. Les valeurs de  $\theta$  semblent légèrement plus élevées dans la martensite que dans la bainite.
- Comportement activé thermiquement : les essais de sauts de vitesse et de sauts de température ont permis d'étudier l'évolution du volume d'activation  $V^*$  et de l'énergie d'activation  $\Delta G_0$ . La forte dépendance de  $V^*$  et  $\Delta G$  en température montre le rôle important joué par les mécanismes activés thermiquement dans le domaine de la transition ductile / fragile. Les valeurs de  $V^*$  et  $\Delta G$  sont proches de celles mesurées dans le Fer- $\alpha$  [AST81]. On montre également qu'il n'y a pas d'effet significatif de la microstructure sur le comportement activé thermiquement.
- Evolution de la ténacité : une campagne d'essais a été réalisée sur des éprouvettes CT 12,5 afin de caractériser l'évolution de la ténacité  $K_{JC}$  pour les deux microstructures. Les dispersions de  $K_{JC}$  augmentent fortement avec la température : à  $T$  fixée, les valeurs de  $K_{JC}$  sont plus élevées dans la martensite que dans la bainite, ce qui peut être interprété comme une conséquence de la microstructure plus fine. Les dispersions sont globalement en assez bon accord avec les prévisions de l'approche 'Master Curve'. On note cependant que ce type d'approche sous estime les valeurs de  $K_{JC}$  dans la bainite, tandis qu'elles sont surestimées dans la martensite.
- Etude fractographique : Une étude fractographique a été réalisée sur les éprouvettes de traction simple ainsi que les éprouvettes CT. En traction simple, les faibles niveaux de triaxialité conduisent à une rupture ductile, sauf à  $T = -196^\circ\text{C}$  dans la bainite, où la rupture est de nature transgranulaire fragile. Dans les éprouvettes CT, l'identification des sites d'amorçage du clivage est délicate, sauf pour deux éprouvettes dont la rupture est amorcée sur des particules de MnS. La plupart des sites de clivages identifiés ne font pas apparaître de particules de seconde phase, ce qui n'est pas incompatible avec l'hypothèse d'une rupture amorcée sur des carbures. Dans la martensite, des faciès de décohésion intergranulaire sont observés.

## Références bibliographiques

[AST81] ASTIE (P.), PEYRADE (J.P.), GROH (P.) – *Thermally activated evolution of the dislocation structure generated by low temperature deformation and associated damping phenomena in pure iron*. Journal de Physique, Colloque C5, supplément au n°10, Tome 42, pp. 91-96, 1981.

[AST98] ASTM E 1921 Standard – *Standard test method for determination of reference temperature  $T_0$  for ferritic steels in the transition range*. Annual Book of ASTM Standards, vol n°3.01, 1998.

[BER83] BEREMIN (F.M.) – *A local Criterion for Cleavage Fracture of a Nuclear Pressure Vessel Steel*. Metallurgical Transactions. A, vol n°14A, pp. 2277-2287, 1983.

[BÖH01] BÖHMERT (J.), MÜLLER (G.) – *Thermally activated deformation of irradiated reactor pressure vessel steel*. Journal of Nuclear Materials, vol. n°301, pp. 227-232, 2001.

[BON04] BONADE (R.), SPÄTIG (P.), VICTORIA (M.), YAMAMOTO (T.), ODETTE (G. R.) – *Tensile properties of a tempered martensitic iron-chromium-carbon model alloy*. Journal of Nuclear Materials, vol. n°329-333, pp. 278-282, 2004.

[BON05] BONADE (R.), SPÄTIG (P.) – *On the strain hardening of tempered martensitic alloys*. Materials Science and Engineering, vol. n°400-401, pp. 234-240, 2005.

[BRO78] BROZZO (P.), BUZZICHELII (G.), MANSCANZONI (A.), MIRABILE (M.) – *Microstructure and cleavage resistance of low carbon bainitic steels*. Metal Science, vol. n°11, pp. 123-129, 1978.

[HAH84] HAHN (G. T.) – *The influence of microstructure on brittle fracture toughness*. Metallurgical Transactions, vol. n°15, pp. 947-959, 1984.

[HAR69] HARDING (J.) – *The effect of grain size and strain rate on the lower yield stress of pure iron at 288°K*. Acta Metallurgica, vol. n°17, pp. 949-958, 1969.

[HAU05] HAUSILD (P.), BERDIN (C.), BOMPARD (P.) – *Prediction of cleavage fracture for a low-alloy steel in the ductile to brittle transition range*. Material Science and Engineering A, vol. n° 391, pp. 188-197, 2005.

[HUT68] HUTCHINSON (J.W.) - *Singular behavior at the end of a tensile crack in a hardening material*. Journal of Mechanics and Physics of Solids, vol. n°16, pp. 13-31, 1968.

[JAY79] JAYATILAKA (A. De S.) – *Statistical approaches to brittle fracture*. Fracture of Engineering Brittle Materials, pp. 117-162, 1979.

[KEH63] KEH (A.S.), WEISMANN (S.), in *Electron Microscopy and Strength of Crystals*, Thomas, G. and Washburn, J. (eds.), Interscience, New York, 231.

[LEE02] LEE (S.), KIM (S.), HWANG (B.), LEE (B. S.), LEE (C.G.) – *Effect of carbide distribution on the fracture toughness in the transition temperature region of an SA 508 steel*. Acta Materallia, vol. n°50, pp. 4755-4762, 2002.

[MÄN99] MÄNTYLÄ (M.), ROSSOL (A.), NEDBAL (I.), PRIOUL (C.), MARINI (B.) – *Fractographic observations of cleavage fracture initiation in a bainitic A508 steel*. Journal of Nuclear Materials, vol. n°264, pp. 257-262, 1999.

[MAR04] MARINI (B.) – *Les fondements de l'approche 'Master Curve'*. Document Technique DMN, CEA, 2004.

[NAK66] NAKADA (Y.), KEH (A.S.) – *Latent hardening in iron single crystals*. Acta Metallurgica, vol. n°14, Issue 8, pp. 961-973, 1966.

[NEM98] NEMAT-NASSER (S.), OKINAKA (T.), NI (L.) – *A physically based constitutive model for BCC crystals with application to polycrystalline Tantalum*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, vol. 46, n°6, pp. 1009-1038, 1998.

[PES04] PESCI (R.) – *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 des Arts et Métiers, CER Metz, 2004.

[REN98] RENEVEY (S.) – *Approches globale et locale de la rupture dans le domaine de transition ductile-fragile d'un acier faiblement allié* – Thèse de Doctorat, Université Paris 11 Orsay / CEA.

[ROS98] ROSSOL (A.) – *Détermination de la ténacité d'un acier faiblement allié à partir de l'essai Charpy instrumenté*. – Thèse de Doctorat, Ecole Centrale Paris, 1998.

[SEK04] SEKFALI (S.) – *Influence de la microstructure sur le comportement local dans les aciers 16MND5*. Thèse de Doctorat, Ecole Centrale Paris, 2004.

[SPL71] SPITZIG (W.A.), LESLIE (W.C.) – *Solid-solution softening and thermally activated flow in alloys of Fe with 3at.% Co, Ni or Si*. Acta Metallurgica, vol. n°19, pp. 1143-1152, 1971.

[TAN71] TANAKA (T.), WATANABE (S.) – *The temperature dependence of the yield stress and solid solution softening in Fe-Ni and Fe-Si alloys*. Acta Metallurgica, vol. n°19, pp. 991-1000, 1971.

[TAN98] TANG (M.), KUBIN (L.), CANOVA (G.R.) – *Dislocation Mobility and the Mechanical Response of B.C.C. Single Crystals : A Mesoscopic Approach*. Acta Materallia, vol.46, n°9, pp. 3221-3235, 1998.

[UET03] UENISHI (A.) et TEODOSIU (C.) – *Solid solution softening at high strain rates in Si or/and Mn-added interstitial free steels*. Acta Materalia, vol. n°51, pp. 4437-4446, 2003.

[WAL84] WALLIN (K.) – *The scatter in  $K_{IC}$  results*. Engineering Fracture Mechanics, vol. 19, n°6, pp. 1085-1093, 1984.

[WST84] WALLIN (K.), SAARIO (K.), TÖRRÖNEN (T.)- *Statistical Model for Carbide Induced Brittle Fracture in Steel*. Metal Science, vol. n°18, pp. 13-16, 1984.

[WAL02] WALLIN (K.) – *Master curve analysis of the ‘Euro’ fracture dataset*. Engineering Fracture Mechanics, vol. n°69, pp. 451-481, 2002.

[ZHA99] ZHANG (X. Z.), KNOTT (J. F.) – *Cleavage fracture in bainitic and martensitic microstructures*. Acta Materallia, vol. n°47, pp. 3483-3495, 1999.

## Chapitre IV

# **Formulation et identification d'un modèle de comportement micromécanique**



## TABLE DES MATIÈRES

### IV. Formulation et identification d'un modèle de comportement micromécanique

<b>IV.A</b>	<b>Choix d'un modèle de comportement 'basse température' de l'acier de cuve.</b>	<b>105</b>
	.....	
<i>IV.A.1</i>	<i>Loi d'écoulement</i> .....	<i>106</i>
<i>IV.A.2</i>	<i>Loi d'écrouissage</i> .....	<i>107</i>
<i>IV.A.3</i>	<i>Loi d'évolution des densités de dislocations</i> .....	<i>110</i>
<b>IV.B</b>	<b>Implémentation numérique des équations du modèle</b> .....	<b>111</b>
	.....	
<i>IV.B.1</i>	<i>Rappels de cinématique</i> .....	<i>111</i>
<i>IV.B.2</i>	<i>Description du formalisme en grandes transformations</i> .....	<i>112</i>
<i>IV.B.3</i>	<i>Schéma d'intégration numérique</i> .....	<i>114</i>
<b>IV.C</b>	<b>Identification des paramètres du modèle</b> .....	<b>119</b>
	.....	
<i>IV.C.1</i>	<i>La procédure d'identification des paramètres</i> .....	<i>120</i>
<i>IV.C.2</i>	<i>Etude préliminaire : identification des paramètres à l'aide du modèle d'homogénéisation de Berveiller-Zaoui</i> .....	<i>122</i>
<i>IV.C.3</i>	<i>Identification des paramètres à <math>K</math> et <math>g_c</math> fixés</i> .....	<i>125</i>
<i>IV.C.4</i>	<i>Introduction d'une dépendance de <math>K</math> et <math>g_c</math> en température</i> .....	<i>127</i>
<i>IV.C.5</i>	<i>Proposition d'une procédure d'identification optimisée</i> .....	<i>133</i>
	.....	
	<b>Conclusion du chapitre IV</b> .....	<b>135</b>
	<b>Références bibliographiques</b> .....	<b>137</b>

## Introduction

Dans le **chapitre II**, une revue bibliographique des modèles de plasticité cristalline des métaux de structure C.C. a permis de dégager quelques aspects importants à prendre en compte pour modéliser le comportement local.

Le **chapitre IV** présente le modèle de comportement micromécanique utilisé pour décrire les hétérogénéités de champs locaux dans la microstructure bainitique. Il est composé de trois parties :

- La partie **IV.A** détaille la formulation des équations du modèle : loi d'écoulement, loi d'écrouissage, loi d'évolution des densités de dislocations.
- L'écriture du modèle en grandes transformations et le schéma d'intégration numérique sont présentés dans le sous-chapitre **IV.B**.
- La question de l'identification des paramètres du modèle est traitée dans la partie **III.C**. En synthèse, une procédure optimisée d'identification des paramètres est présentée.

### IV.A Choix d'un modèle de comportement 'basse température' de l'acier de cuve

Plusieurs modèles ont été proposés pour décrire le comportement des métaux de structure cubique centrée à l'échelle cristalline. Bon nombre de ces modèles ont déjà été implémentés dans un code de calcul par éléments finis pour simuler le comportement en plasticité et permettent d'avoir accès à des grandeurs telles que les hétérogénéités de déformations, les concentrations de contrainte ou encore les densités de dislocations sur chacun des systèmes de glissement. Ces informations sont très utiles à l'amélioration de la compréhension des mécanismes de déformation dans les polycristaux. Il faut noter la plupart de ces modèles sont dérivés de ceux utilisés pour la métaux de structure C.F.C. et s'attachent à la description du comportement 'haute température'. Il semble donc logique de prendre comme base les lois décrivant la plasticité dans le régime athermique ( $T > T_a$ ) pour étendre la description au domaine de transition de comportement plastique. Cependant, il est nécessaire de formuler des lois de comportement prenant en compte les mécanismes spécifiques aux basses températures ( $T < T_0$ ), tels que le mécanisme de doubles crans ou encore l'activation préférentielle des systèmes de glissement  $\langle 111 \rangle \{110\}$  par rapport aux  $\langle 111 \rangle \{112\}$ .

Le modèle de comportement que nous utilisons est dérivé de celui de Tabourot et al. (1992), Par la suite, il a été adapté par Arizmendi [ARI99], Hoc [HOC01], puis Eriau [ERI04] aux métaux de structure C.C. dans le régime athermique ( $T > T_a$ ).

Il est écrit dans le cadre des grandes transformations et utilise une décomposition multiplicative des tenseurs gradient de transformation élastique et plastique (cf. chapitre IV.2.a).

D'une part, les développements que nous avons effectués portent sur la prise en compte des mécanismes d'activation thermique dans les lois d'écoulement et d'écrouissage. Nous utilisons un modèle dérivé celui de Louchet *et al.* [LOU78] pour la loi d'écoulement et de celui de Rauch [RAU93] en ce qui concerne la loi d'écrouissage.

D'autre part, nous avons introduit une dépendance en température des différents termes de la loi d'évolution des densités de dislocations, les mécanismes de production et d'annihilation des dislocations étant également fortement dépendants de la température.

#### IV.A.1 Loi d'écoulement

La loi d'écoulement du modèle est basée sur le mouvement thermiquement activé des segments vis [LOU78]. L'équation (IV.1) est déduite de la théorie de l'activation thermique : elle donne la fréquence de formation d'un double décrochement de longueur caractéristique  $l_c$  le long d'un segment vis de longueur  $L$  [KRO63]. L'équation proposée par Louchet est discrétisée sur chacun des 24 systèmes de glissement ( $s$ ).

$$\dot{\gamma}^s = \dot{\gamma}_0 \exp\left[-\frac{\Delta G(\tau_{eff}^s)}{k_B T}\right] \text{signe}(\tau^s) \quad \text{si } \tau_{eff}^s > 0 \quad \text{avec} \quad \dot{\gamma}_0 = 2\rho_m \nu_D b^3 \frac{L^2}{l_c^2}$$

$$\dot{\gamma}^s = 0 \quad \text{sinon} \quad \text{(IV.1)}$$

Le terme pré-exponentiel  $\dot{\gamma}_0$  est supposé constant en première approximation, même s'il dépend de la longueur  $L$  du segment vis [LOU78].

L'énergie d'activation  $\Delta G(\tau_{eff}^s)$  est directement reliée à la cission effective  $\tau_{eff}^s$  s'exerçant sur le système ( $s$ ). Cette cission est égale à la cission appliquée  $\tau^s$  retranchée de la contribution 'athermique'  $\tau_\mu^s$  due aux obstacles (dislocations de type forêt et précipités) :

$$\tau_{eff}^s = \tau^s - \tau_\mu^s \quad \text{(IV.2)}$$

Le terme de contrainte 'athermique' est assez mal choisi car certains paramètres de la loi d'évolution des densités de dislocations sont dépendants de la température. On peut cependant distinguer deux contributions, l'une associée au mécanisme élémentaire de double décrochement et l'autre aux interactions avec les obstacles perçant le plan de glissement ( $s$ ).

$\Delta G(\tau_{eff}^s)$  peut s'exprimer à l'aide du volume d'activation  $V^*$ , qui est défini comme étant la dérivée partielle de  $\Delta G$  par rapport à  $\tau_{eff}^s$  à  $\dot{\epsilon}$  et  $T$  fixées :

$$V^* = - \left. \frac{\partial \Delta G}{\partial \tau_{eff}^s} \right|_{\dot{\epsilon}, T} \quad \text{(IV.3)}$$

L'énergie libre d'activation  $\Delta G_0$  correspond à l'énergie d'activation pour  $\tau_{eff}^s = 0$ , ou autrement dit à la valeur de  $\Delta G$  dans le régime athermique lorsque l'agitation thermique suffit à assurer le franchissement de la barrière d'énergie et que l'apport de la contrainte effective n'est plus nécessaire.

Il faut toutefois noter que le terme  $V^*$  dépend lui-même de la contrainte effective. Considérer  $V^*$  constant serait en contradiction avec les essais expérimentaux de sauts de vitesse, qui

montrent que  $V^*$  est fortement dépendant de  $T$ . Nous avons donc préféré utiliser une loi phénoménologique, proposée par Kocks *et al.* [KOC75].

$$\Delta G(\tau_{eff}^s) = \Delta G_0 \left( 1 - \left( \frac{|\tau_{eff}^s|}{\tau_R} \right)^p \right)^q \quad (IV.4)$$

Les paramètres  $p$  et  $q$  traduisent l'allure du potentiel d'énergie associé à l'obstacle (ici les barrières de Peierls), tandis que  $\tau_R$  est une constante qui désigne la contrainte effective à fournir pour créer un double décrochement à  $T = 0$  K.

#### IV.A.2 Loi d'écrouissage

L'évolution de l'écrouissage repose sur la compétition entre les interactions à courte et longue distance entre les dislocations. Les interactions à courte distance désignent essentiellement la friction de réseau qui génère une contrainte effective  $\tau_{eff}^s$ . Les interactions à longue distance résultent quant à elles de la présence de dislocations forêt et de précipités : il faut fournir respectivement une contrainte  $\tau_i^s$  pour vaincre les arbres de la forêt et une contrainte  $\tau_0$  pour franchir les précipités. La contrainte d'écoulement  $\tau^s$  requise pour activer le glissement plastique est alors égale à la somme de ces trois contributions :

$$\tau^s = \tau_0 + \tau_{eff}^s + \tau_i^s \quad (IV.5)$$

Le modèle proposé par Rauch établit une expression particulière de la contrainte interne  $\tau_i^s$ . En raisonnant sur un brin de dislocation épinglé sur deux obstacles et présentant une partie vis soumise à la friction de réseau, ainsi qu'une partie mixte,  $\tau_i^s$  s'écrit :

$$\tau_i^s = \frac{(\alpha \mu b)^2 \rho}{\tau^s} \quad (IV.6)$$

Le terme  $\rho$  désigne la densité totale de dislocations perçant le plan ( $s$ ). Afin de représenter individuellement l'interaction de chaque système ( $s$ ) avec chacun des 23 systèmes ( $u$ ) potentiellement latents, le terme  $\alpha^2 \rho$  est remplacé par  $\sum_u \alpha^{su} \rho^u$ .

D'autre part, Rauch propose de prendre en compte l'effet des précipités dans son modèle, en retranchant  $\tau_0$  au dénominateur dans l'expression (IV.6). L'expression de  $\tau_i^s$  devient :

$$\tau_i^s = \frac{(\mu b)^2 \sum_u \alpha^{su} \rho^u}{\tau^s - \tau_0} \quad (IV.7)$$

La combinaison des équations (IV.5) et (IV.7) permet d'en déduire une expression de la contrainte d'écoulement  $\tau^s$  ; cette équation définit ainsi notre loi d'écrouissage :

$$\tau^s = \tau_0 + \frac{\tau_{eff}^s}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{\tau_{eff}^s{}^2 + 4(\mu b)^2 \sum_u a^{su} \rho^u} \quad (IV.8)$$

$\tau^s$  dépend par conséquent de 2 types de variables :

- la cission effective, qui dépend de  $T$  et  $\varepsilon$  mais pas de l'état de déformation local ;
- les densités de dislocations locales  $\rho^s$  sur tous les systèmes, et qui sont reliées à la déformation locale.

A partir de l'expression de l'équation (IV.8), il est possible de retrouver deux expressions caractéristiques des comportements 'haute' et 'basse' température dans le fer  $\alpha$  :

- Dans le cas du comportement 'haute température', le terme  $\tau_{eff}^s$  devient négligeable devant les autres termes et on retrouve alors une loi d'écrouissage comparable à celle du modèle de Tabourot :

$$\tau^s = \tau_0 + \mu b \sqrt{\sum_u a^{su} \rho^u} \quad (IV.9)$$

- Dans le cas du comportement 'basse température', le mécanisme de double décrochement devient prépondérant et  $\tau_i^s$  devient négligeable par rapport à  $\tau_{eff}^s$  ; l'expression (IV.7) permet alors de déduire la relation :

$$\tau^s = \tau_{eff}^s + \frac{(\mu b)^2 \sum_u a^{su} \rho^u}{\tau_{eff}^s} \quad (IV.10)$$

Dans ce cas précis, la dépendance entre la contrainte d'écoulement et la densité de dislocations tend à devenir linéaire. Ce type de dépendance a été observé expérimentalement dans le fer  $\alpha$  déformé à basse température [KEH63]. La loi d'écrouissage (IV.8) assure de façon continue cette transition de régime de comportement.

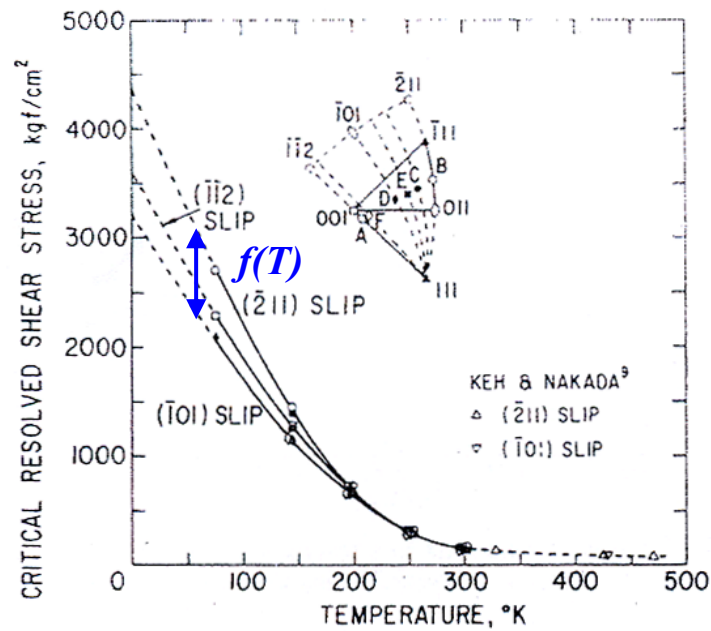
La plasticité à froid dans les métaux de structure cubique centrée se caractérise également par une non équivalence des systèmes de glissement  $\langle 111 \rangle \{110\}$  et  $\langle 111 \rangle \{112\}$ . Ces derniers systèmes tendent à s'activer de plus en plus difficilement lorsque la température diminue. D'autre part, ce phénomène s'accompagne d'une asymétrie des systèmes de glissement  $\langle 111 \rangle \{112\}$ .

La nature de ces mécanismes étant encore mal comprise, notre approche consiste à identifier l'écart entre les familles de systèmes  $\{110\}$  et  $\{112\}$  sur les résultats expérimentaux obtenus sur le fer pur [KEH63], [KEH65]. L'écart entre les familles de systèmes est décrit par deux valeurs de  $\tau_0$  suivant les systèmes  $\{110\}$  ou  $\{112\}$  :

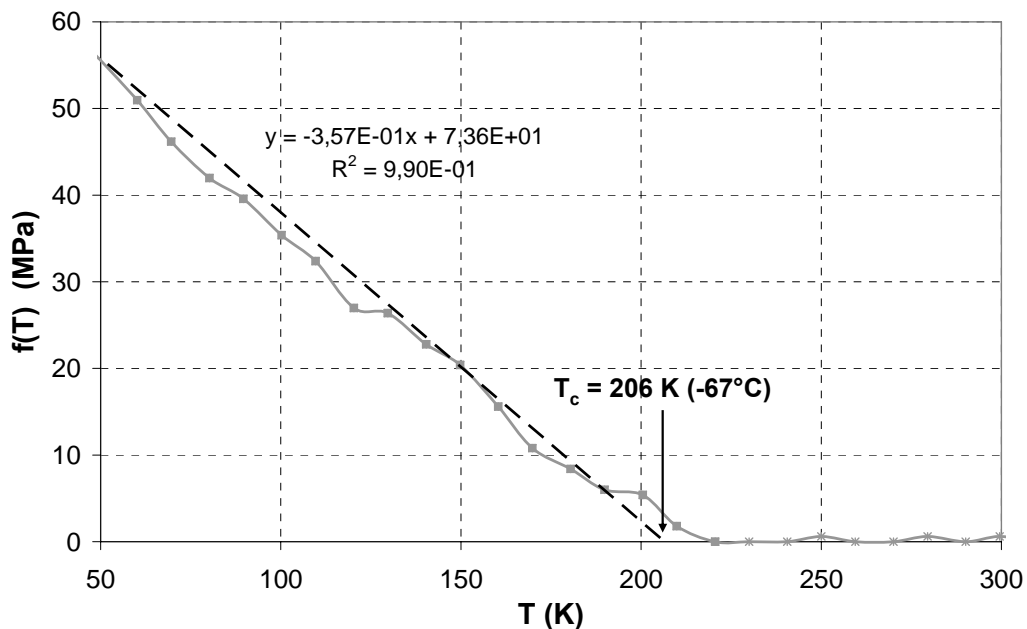
$$\tau_0^{\{110\}} = \tau_0 \quad (IV.11)$$

$$\tau_0^{\{112\}moyen} = \frac{\tau_0^{\{112\}f} + \tau_0^{\{112\}d}}{2} = \tau_0 + f(T) \quad (IV.12)$$

Il est à noter que le phénomène d'asymétrie du glissement n'est pas pris en compte dans notre modèle : la cission exercée sur les systèmes  $\{112\}$  est calculée comme étant la moyenne de la cission dans le sens de glissement dit 'facile' et le sens 'difficile'.



**Fig. IV.1:** Evolution de la cission résolue critique d'activation des systèmes de glissement  $\langle 111 \rangle \{110\}$  et  $\langle 111 \rangle \{112\}$  dans le Fer- $\alpha$ , d'après [KEH63].



**Fig. IV.2:** Identification de l'écart  $f(T)$  entre les systèmes  $\{110\}$  et  $\{112\}$ , d'après [KEH63].

La fonction écart  $f(T)$  entre les cissions critiques des 2 familles de systèmes de glissement est identifiée en s'appuyant sur les données expérimentales de la Figure IV.1. En dessous d'une valeur critique de température  $T_c$ , l'écart  $f(T)$  est bien corrélé par une fonction linéaire de  $T$  (figure IV.2) :

$$f(T) = -0,36 T + 74 \quad (\text{IV.13})$$

Au dessus de  $T_c$ , l'écart est identiquement nul. Dans l'équation (IV.13), la température  $T$  est exprimée en °K.

### IV.A.3 Loi d'évolution des densités de dislocations

La loi d'évolution des densités de dislocations est celle du modèle de plasticité cristalline de Tabourot *et al.* Cette loi décrit l'écrouissage des métaux de structure C.C. au dessus de la température de transition de comportement plastique, mais n'est à priori pas adaptée au domaine de la transition [ESS79] [MEC81] [EST83]. Nous avons entrepris des modifications pour tenir compte, de la manière la plus simple possible, de l'évolution des mécanismes élémentaires de plasticité lorsque  $T < T_a$ .

La loi d'évolution de  $\rho_s$  fait intervenir une compétition entre un terme de multiplication des dislocations, (essentiellement par sources de Frank Read lorsque  $T > T_a$ ) et un terme d'annihilation des dislocations de signe opposé (équation IV.14).

$$\dot{\rho}^s = \frac{|\dot{\gamma}^s|}{b} \left( \frac{I}{A^s(T)} - g_c(T) \rho^s \right) \quad (\text{IV.14})$$

$$\frac{I}{A^s(T)} = \frac{I}{D_{latte}} + \frac{\sqrt{\sum_{u \neq s} \rho^u}}{K(T)} \quad (\text{IV.15})$$

Dans l'expression du libre parcours moyen  $A^s$  les obstacles sont à la fois constitués par les interfaces entre les lattes (via le paramètre  $D_{latte}$ ) et les dislocations perçant le plan de glissement du système ( $s$ ). Le paramètre  $K$  est relié à l'efficacité du mécanisme de multiplication des dislocations : plus la valeur de  $K$  est grande et moins les sources de dislocations sont efficaces. Lors de la procédure d'identification du modèle, nous avons d'abord fait l'hypothèse que  $K$  et  $g_c$  ne dépendent pas de  $T$ . Cependant, cette approche s'est révélée trop simpliste.

D'une part, comme les mécanismes de multiplication sont affectés par la transition de comportement plastique,  $K$  doit dépendre de la température. Toutefois, les mécanismes de multiplication opérant à  $T < T_a$  sont mal connus à l'échelle de la plasticité cristalline. Afin de dégager une loi 'empirique'  $K(T)$ , notre démarche consiste à identifier  $K$  séparément à chaque température, sur les essais mécaniques de traction simple.

D'autre part, dans l'équation (I.V14), le processus d'annihilation est relié au mécanisme de glissement dévié qui permet à des dislocations de signe opposé de s'annihiler. Or, le mécanisme de glissement dévié est activé thermiquement. Rigoureusement, l'énergie d'activation associée à ce mécanisme devrait dépendre de la cission effective sur le plan de glissement dévié. Dans un souci de simplicité, la distance critique d'annihilation  $g_c$  suit une loi de type Arrhenius à deux paramètres (IV.16) :

$$g_c(T) = g_{c0} \exp\left[-\frac{E_{gc}}{k_B T}\right] \quad (\text{IV.16})$$

L'énergie d'activation  $E_{gc}$  et le terme pré-exponentiel  $g_{c0}$  sont considérés constants. Cette loi phénoménologique permet de décrire continûment l'évolution du mécanisme d'annihilation en fonction de la température.

## IV.B Implémentation numérique des équations du modèle

L'objectif de ce sous-chapitre est dans un premier temps de décrire l'approche cinématique, le cadre d'écriture du modèle en grandes transformations, ainsi que la méthode d'intégration numérique de type 'forward gradient'.

### IV.B.1 Rappels de cinématique

On définit  $C_0$  et  $C_t$  les configurations d'un milieu continu à l'état initial et à l'instant  $t$ . Le point matériel  $M$  est repéré dans  $C_0$  et  $C_t$  par les vecteurs  $\underline{x}_0$  et  $\underline{x}$  respectivement. Le tenseur gradient de transformation est donné par la relation :

$$\underline{\underline{F}} = \frac{\partial \underline{x}(\underline{x}_0, t)}{\partial \underline{x}_0} \quad (\text{IV.17})$$

Le champ de vitesse est alors défini par l'équation :

$$\underline{\underline{\dot{x}}} = \frac{\partial \underline{x}(\underline{x}_0, t)}{\partial t} \quad (\text{IV.18})$$

Le gradient de vitesse est défini par la relation ci-dessous. En combinant les équations (IV.17) et (IV.18), on peut montrer que  $\underline{\underline{L}}$  s'exprime sous la forme :

$$\underline{\underline{L}} = \frac{\partial \underline{\underline{\dot{x}}}(\underline{x}_0, t)}{\partial \underline{x}(\underline{x}_0, t)} = \frac{\partial \underline{\underline{\dot{x}}}(\underline{x}_0, t)}{\partial \underline{x}_0} \frac{\partial \underline{x}_0}{\partial \underline{x}(\underline{x}_0, t)} = \underline{\underline{\dot{F}}} \underline{\underline{F}}^{-1} \quad (\text{IV.19})$$

Le tenseur gradient de vitesses se décompose respectivement en deux parties symétrique et antisymétrique : le taux de déformation  $\underline{\underline{D}}$  et le taux de rotation  $\underline{\underline{W}}$  :

$$\underline{\underline{D}} = \frac{1}{2} (\underline{\underline{L}} + \underline{\underline{L}}^T) \quad (\text{IV.20})$$

$$\underline{\underline{W}} = \frac{1}{2} (\underline{\underline{L}} - \underline{\underline{L}}^T) \quad (\text{IV.21})$$

Le tenseur des dilatations  $\underline{\underline{C}}$  est défini par :



$$\underline{\underline{C}} = \underline{\underline{F}}^T \underline{\underline{F}} \quad (\text{IV.22})$$

A partir de  $\underline{\underline{C}}$ , on peut définir le tenseur des déformations de Green Lagrange  $\underline{\underline{E}}$  par l'équation (IV.23) :

$$\underline{\underline{E}} = \frac{1}{2}(\underline{\underline{C}} - \underline{\underline{I}}) \quad (\text{IV.23})$$

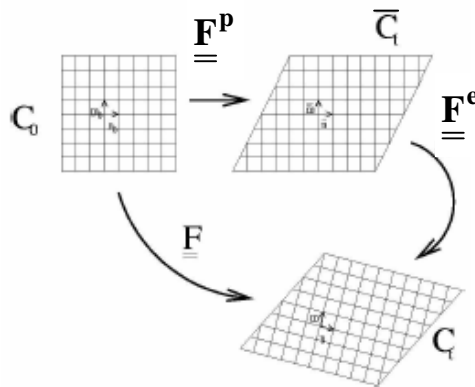
Dans notre modélisation, le code de calcul ABAQUS utilise le formalisme des déformations infinitésimales, mais en réactualisant la configuration à chaque incrément (schéma lagrangien réactualisé), ce qui permet de prendre en compte les grandes transformations.

#### IV.B.2 Description du formalisme en grandes transformations

Ce paragraphe décrit la façon dont les équations du modèle de comportement sont introduites dans un cadre en grandes transformations. L'ensemble des lois de comportement, ainsi que le schéma d'intégration (présenté dans le chapitre qui suit) ont été introduits dans le code éléments finis commercial ABAQUS à l'aide d'une sous routine utilisateur de type UMAT. Le formalisme que nous utilisons est basé sur la décomposition du tenseur gradient de transformation  $\underline{\underline{F}}$  en 2 contributions : une contribution élastique  $\underline{\underline{F}}^e$  et une contribution plastique  $\underline{\underline{F}}^p$  [LEE69] :

$$\underline{\underline{F}} = \underline{\underline{F}}^e \underline{\underline{F}}^p \quad (\text{IV.24})$$

On passe de la configuration initiale  $C_0$  à la configuration déformée  $C_t$  via une configuration intermédiaire  $\bar{C}_t$ . La première étape de déformation correspond au glissement plastique entre plans, et la seconde aux rotations de réseau et aux dilatations élastiques.



**Fig. IV.3:** Décomposition du tenseur gradient de la déformation  $\underline{\underline{F}}$

Lorsqu'on adopte cette décomposition, le gradient de vitesses  $\underline{\underline{L}}$  s'exprime :

$$\underline{\underline{L}} = \underline{\underline{\dot{F}}} \underline{\underline{F}}^{-1} = \underline{\underline{\dot{F}}^e} \underline{\underline{F}}^{e-1} + \underline{\underline{F}}^e \underline{\underline{\dot{F}}^p} \underline{\underline{F}}^{p-1} \underline{\underline{\dot{F}}^e}^{-1} \quad (\text{IV.25})$$

Si on note respectivement  $\underline{\underline{L}}^p$  et  $\underline{\underline{L}}^e$  les gradients de transformation associés à la première et à la seconde étape de la transformation, alors le tenseur  $\underline{\underline{L}}$  peut s'écrire comme la somme de sa composante élastique et de sa composante plastique transportée dans la configuration actuelle  $C_t$  :

$$\underline{\underline{L}} = \underline{\underline{L}}^e + \underline{\underline{F}}^e \underline{\underline{L}}^p \underline{\underline{F}}^{e-1} \quad (\text{IV.26})$$

Dans la configuration intermédiaire, le gradient de vitesses est associé au glissement plastique entre les différents plans de glissement et si on définit respectivement par  $\underline{\underline{m}}^s$  et  $\underline{\underline{n}}^s$  les directions de glissement et les normales aux plans, le tenseur  $\underline{\underline{L}}^p$  peut s'exprimer :

$$\underline{\underline{L}}^p = \underline{\underline{F}}^p \underline{\underline{F}}^{p-1} = \sum_s \dot{\gamma}^s \underline{\underline{L}}^s \quad \text{avec} \quad \underline{\underline{L}}^s = \sum_s \underline{\underline{m}}^s \otimes \underline{\underline{n}}^s \quad (\text{IV.27})$$

La partie plastique du gradient de vitesses peut également se décomposer en 2 contributions symétrique  $\underline{\underline{D}}^p$  et antisymétrique  $\underline{\underline{W}}^p$ , définies à partir des tenseurs  $\underline{\underline{D}}^s$  et  $\underline{\underline{W}}^s$  :

$$\underline{\underline{D}}^p = \sum_s \dot{\gamma}^s \underline{\underline{D}}^s \quad \text{avec} \quad \underline{\underline{D}}^s = \underline{\underline{m}}^s \otimes_s \underline{\underline{n}}^s \quad (\text{IV.28})$$

$$\underline{\underline{W}}^p = \sum_s \dot{\gamma}^s \underline{\underline{W}}^s \quad \text{avec} \quad \underline{\underline{W}}^s = \underline{\underline{m}}^s \otimes_A \underline{\underline{n}}^s \quad (\text{IV.29})$$

Dans le cadre du modèle, nous supposons de petites déformations élastiques et de grandes rotations du réseau cristallin. Cette hypothèse peut être traduite en équations en utilisant la décomposition polaire du tenseur  $\underline{\underline{F}}^e$  :

$$\underline{\underline{F}}^e = \underline{\underline{V}} \underline{\underline{R}} \quad (\text{IV.30})$$

où la contribution  $\underline{\underline{V}}$  est une dilatation pure et  $\underline{\underline{R}}$  une rotation pure. L'hypothèse des petites déformations élastiques nous permet d'écrire  $\underline{\underline{V}}$  sous la forme :

$$\underline{\underline{V}} = \underline{\underline{I}} + \underline{\underline{\varepsilon}} \quad \text{avec} \quad \underline{\underline{\varepsilon}} \ll 1 \quad (\text{IV.31})$$

Cette forme particulière du tenseur  $\underline{\underline{V}}$  nous permet de simplifier la loi de comportement hypoélastique, qui lie la dérivée objective du tenseur des contraintes de Cauchy au tenseur taux de déformation élastique  $\underline{\underline{D}}^e$  :

$$\underline{\underline{\hat{\sigma}}} = \underline{\underline{\kappa}}^e : \underline{\underline{D}}^e \quad (\text{IV.32})$$

Nous utilisons la dérivation objective convective de Jaumann qui consiste à transposer la quantité à dériver (ici  $\underline{\underline{\sigma}}$ ) dans une configuration de référence. Le tenseur  $\underline{\underline{W}}^e$  correspond aux

taux de rotation entre la configuration intermédiaire  $\bar{C}_t$  et la configuration actuelle  $C_t$ . L'utilisation des dérivées objectives permet de vérifier l'indépendance de la loi de comportement par rapport au référentiel [FOR99].

$$\underline{\underline{\dot{\sigma}}} = \underline{\underline{\dot{\sigma}}} + \underline{\underline{\sigma}} \underline{\underline{W}}^e - \underline{\underline{W}}^e \underline{\underline{\sigma}} \quad (\text{IV.33})$$

Dans le cas le plus général, le tenseur  $\underline{\underline{\kappa}}^e$  est défini à partir de la densité d'énergie par unité de volume non déformé  $w(\underline{\underline{E}}^e)$  :

$$\underline{\underline{\kappa}}^e = \underline{\underline{F}}^e \cdot \left[ \underline{\underline{F}}^e \cdot \frac{\partial^2 w(\underline{\underline{E}}^e)}{\partial \underline{\underline{E}}^e \partial \underline{\underline{E}}^e} \cdot \underline{\underline{F}}^{eT} \right] \cdot \underline{\underline{F}}^{eT} \quad (\text{IV.34})$$

L'équation (IV.31) permet de simplifier l'expression de  $\underline{\underline{\kappa}}^e$  en réalisant un développement de Taylor de  $w(\underline{\underline{E}}^e)$ . On montre alors que lorsque  $|\underline{\underline{\varepsilon}}| \rightarrow 0$

$$\underline{\underline{\kappa}}^e = \underline{\underline{C}}^e \quad \text{avec} \quad C_{ijkl}^e = R_{ip} R_{jq} R_{km} R_{ln} \bar{C}_{pqmn}^e \quad (\text{IV.35})$$

$$\underline{\underline{\dot{\sigma}}} = \underline{\underline{C}}^e : \underline{\underline{D}}^e + \underline{\underline{W}}^e \underline{\underline{\tau}} - \underline{\underline{\tau}} \underline{\underline{W}}^e \quad (\text{IV.36})$$

Il est plus pratique d'exprimer  $\underline{\underline{\dot{\sigma}}}$  en fonction de  $\underline{\underline{D}}$ ,  $\underline{\underline{D}}^p$ ,  $\underline{\underline{W}}$  et  $\underline{\underline{W}}^p$ . Cette nouvelle expression fait intervenir un tenseur  $\underline{\underline{R}}^s$  défini par l'équation (IV.38) :

$$\underline{\underline{\dot{\sigma}}} = \underline{\underline{C}}^e : \underline{\underline{D}} + \underline{\underline{W}} \underline{\underline{\tau}} - \underline{\underline{\tau}} \underline{\underline{W}} - \sum_s \dot{\gamma}^s \underline{\underline{R}}^s \quad (\text{IV.37})$$

$$\underline{\underline{R}}^s = \underline{\underline{C}}^e : \underline{\underline{D}}^s + \underline{\underline{W}}^s \underline{\underline{\tau}} - \underline{\underline{\tau}} \underline{\underline{W}}^s \quad (\text{IV.38})$$

L'hypothèse des petites déformations élastiques nous permet également de calculer l'évolution de la rotation de réseau cristallin :

$$\underline{\underline{\dot{R}}} = \underline{\underline{R}} \left( \underline{\underline{W}} - \sum_s \dot{\gamma}^s \bar{\underline{\underline{m}}}^s \otimes_A \bar{\underline{\underline{n}}}^s \right) \quad (\text{IV.39})$$

### IV.B.3 Schéma d'intégration numérique

Les équations de la loi de comportement constituent un système différentiel à intégrer. A chaque itération lors d'un incrément, l'incrément de temps  $\Delta t$  et le gradient de transformation  $\underline{\underline{F}}$  sont connus et il faut calculer l'évolution de la contrainte de Cauchy  $\underline{\underline{\sigma}}$ , ainsi que des

variables locales  $\dot{\gamma}^s$ ,  $\rho^s$  et  $\underline{R}$ . La méthode d'intégration est basée sur celle utilisée par Teodosiu *et al.* [TEO91], puis adaptée à nos lois de comportement.

### a) Expression de l'incrément de glissement $\Delta\gamma^s$

Nous avons utilisé un schéma de type Forward Gradient, dans lequel les incréments de glissements sont calculés de façon implicite. Les autres grandeurs sont linéarisées et calculées explicitement à chaque pas de temps. Il s'agit donc d'un schéma d'intégration semi implicite. L'incrément de glissement est défini de la manière suivante : le théorème des accroissements finis est appliqué à la fonction  $\dot{\gamma}^s(t)$  sur l'intervalle  $\Delta t$ , ce qui permet d'écrire :

$$\Delta\gamma^s = \dot{\gamma}^s(t + \theta\Delta t)\Delta t \quad (\text{IV.40})$$

En faisant une approximation linéaire de  $\dot{\gamma}^s$  dans l'intervalle  $\Delta t$ , il vient que :

$$\Delta\gamma^s = \left[ (1-\theta)\dot{\gamma}^s(t) + \theta\dot{\gamma}^s(t + \Delta t) \right] \Delta t \quad (\text{IV.41})$$

A l'instant  $t$ ,  $\dot{\gamma}^s(t)$  est donné par la loi d'écoulement. Le terme  $\dot{\gamma}^s(t + \Delta t)$  est exprimé à l'aide d'un développement de Taylor. Dans un schéma de type Forward Gradient, le développement est effectué par rapport aux deux variables suivantes :

- la cission d'écoulement  $\tau^s$  d'une part ;
- la cission critique d'écoulement  $\tau_c^s$  d'autre part, qui est définie par la valeur de  $\tau^s$  requise pour activer le glissement sans apport de l'activation thermique.

Le paramètre  $\theta$  doit quant à lui être compris entre 0 et 1. Nous avons choisi  $\theta = 0,5$ , qui correspond à une erreur minimale. Toutefois cette valeur conduit à une stabilité numérique moindre que  $\theta = 1$ , ce qui contraint à utiliser des pas de temps très petits.

$$\dot{\gamma}^s(t + \Delta t) = \dot{\gamma}^s(t) + \left. \frac{\partial \dot{\gamma}^s}{\partial \tau^s} \right|_t \Delta\tau^s + \left. \frac{\partial \dot{\gamma}^s}{\partial \tau_c^s} \right|_t \Delta\tau_c^s \quad (\text{IV.42})$$

Pour expliciter l'incrément de glissement  $\Delta\gamma^s$  il convient d'abord d'exprimer la loi d'écoulement en fonction des variables  $\tau^s$  et  $\tau_c^s$ .

En introduisant l'expression de la contrainte interne (IV.7) dans l'équation (IV.5), nous obtenons une expression de la cission d'écoulement  $\tau^s$  en fonction notamment de la cission effective  $\tau_{eff}^s$  :

$$\tau^s = \tau_0 + \frac{(\mu b)^2 \sum a^{su} \rho^u}{\tau^s - \tau_0} + \tau_{eff}^s \quad (\text{IV.43})$$

Par définition,  $\tau_c^s$  correspond à la valeur de  $\tau^s$  requise pour activer le glissement sans apport de l'activation thermique, c'est à dire pour une contrainte effective  $\tau_{eff}^s$  nulle. En remplaçant  $\tau_{eff}^s$  par 0 dans l'équation (IV.43), il vient :

$$\tau_c^s = \tau_0 + \mu b \sqrt{\sum_u a^{su} \rho^u} \quad (\text{IV.44})$$

En utilisant les équations (IV.43) et (IV.44), il est ainsi possible d'écrire  $|\tau_{eff}^s|$  comme une fonction de  $|\tau^s|$  et  $\tau_c^s$  :

$$|\tau_{eff}^s| = |\tau^s| - \tau_0 + \frac{(\tau_c^s - \tau_0)^2}{|\tau^s| - \tau_0} \quad (\text{IV.45})$$

En combinant les équations (IV.1) et (IV.4), on peut dans un premier temps exprimer la loi d'écoulement directement en fonction de  $|\tau_{eff}^s|$  :

$$\dot{\gamma}^s = \dot{\gamma}_0 \exp \left[ -\frac{\Delta G_0}{k_B T} \left[ I - \left( \frac{|\tau_{eff}^s|}{\tau_R} \right)^p \right]^q \right] \text{signe}(\tau^s) \quad (\text{IV.46})$$

Si on utilise la relation (IV.46), la loi d'écoulement peut finalement s'écrire comme une fonction des variables  $\tau^s$  et  $\tau_c^s$  :

$$\dot{\gamma}^s = \dot{\gamma}_0 \exp \left( -\frac{\Delta G_0}{k_B T} \left[ I - \left( \frac{1}{\tau_0} \left[ \tau^s - \tau_0 - \frac{(\tau^s - \tau_0)^2}{\tau^s - \tau_0} \right] \right)^p \right]^q \right) \quad (\text{IV.47})$$

Cette dernière expression nous permet de calculer les dérivées respectives de  $\dot{\gamma}^s(t)$  par rapport à  $\tau^s$  et  $\tau_c^s$  dans le cas particulier de notre loi de comportement :

$$\frac{\partial \dot{\gamma}^s}{\partial \tau^s} \Big|_t = \frac{\dot{\gamma}^s \Delta G_0 p q}{\tau_R k_B T} \left( \frac{|\tau_{eff}^s|}{\tau_R} \right)^{p-1} \left[ I - \left( \frac{|\tau_{eff}^s|}{\tau_R} \right)^p \right]^{q-1} \left[ I + \left( \frac{\tau_c^s}{|\tau^s| - \tau_0} \right)^2 \right] \text{signe}(\tau^s) \quad (\text{IV.48})$$

$$\frac{\partial \dot{\gamma}^s}{\partial \tau_c^s} \Big|_t = -\frac{\dot{\gamma}^s \Delta G_0 p q}{\tau_R k_B T} \left( \frac{|\tau_{eff}^s|}{\tau_R} \right)^{p-1} \left[ I - \left( \frac{|\tau_{eff}^s|}{\tau_R} \right)^p \right]^{q-1} \frac{2 \tau_c^s}{|\tau^s| - \tau_0} \quad (\text{IV.49})$$

Et l'incrément de glissement s'écrit :

$$\Delta \gamma^s = \left[ \dot{\gamma}^s(t) + \theta \left( \frac{\partial \dot{\gamma}^s}{\partial \tau^s} \Big|_t \Delta \tau^s + \frac{\partial \dot{\gamma}^s}{\partial \tau_c^s} \Big|_t \Delta \tau_c^s \right) \right] \Delta t \quad (\text{IV.50})$$

### b) Calcul de $\Delta\gamma^s$ par résolution du système Forward Gradient

La méthode de résolution consiste à expliciter les termes  $\Delta\tau^s$  et  $\Delta\tau_c^s$  en fonction de  $\Delta\gamma^s$ , de manière à faire apparaître un système linéaire de la forme [PEI83] :

$$\sum_u N^{su} \Delta\gamma^u = \left[ \dot{\gamma}^s(t) + \underline{\underline{Q}}^s : \underline{\underline{L}} \right] \Delta t \quad (\text{IV.51})$$

A partir de  $\Delta\tau^s$  et  $\Delta\tau_c^s$ , on peut exprimer les tenseurs  $N^{su}$  et  $\underline{\underline{Q}}^s$  puis résoudre le système.

#### - Calcul de $\Delta\tau^s$ :

A partir des relations établies dans le formalisme des grandes transformations (chapitre IV.B.2), on peut montrer que la dérivée temporelle de la cission résolue  $\tau^s$  peut se mettre sous la forme :

$$\dot{\tau}^s = \underline{\underline{R}}^s : \underline{\underline{D}}^e \quad (\text{IV.52})$$

où le tenseur  $\underline{\underline{R}}^s$  est défini par l'équation (IV.38).

Par linéarisation de l'équation (IV.51) dans l'intervalle  $\Delta t$ , on en déduit l'expression de  $\Delta\tau^s$  :

$$\Delta\tau^s = \underline{\underline{R}}^s : \left( \underline{\underline{D}}\Delta t - \sum_u \Delta\gamma^u \underline{\underline{D}}^u \right) \quad (\text{IV.53})$$

#### - Calcul de $\Delta\tau_c^s$ :

L'évolution de la cission critique s'exerçant sur chacun des systèmes est reliée aux glissements sur l'ensemble des systèmes par l'intermédiaire de la matrice d'écrouissage notée  $h^{su}$  :

$$\dot{\tau}_c^s = \sum_u h^{su} |\dot{\gamma}^u| \quad (\text{IV.54})$$

L'expression de la matrice  $h^{su}$  peut être obtenue en combinant les équations (IV.14), (IV.15) et (IV.53). Cette matrice est identique à celle obtenue avec le modèle de comportement de Tabourot et al. [TAB92].

$$h^{su} = \frac{\mu a^{su}}{2} \frac{I}{\sqrt{\sum_t a^{st} \rho^t}} \left( \frac{\sqrt{\sum_{t \neq s} \rho^t}}{K} - \frac{g_c}{b} \rho^u \right) \quad (\text{IV.55})$$

La linéarisation de l'équation (IV.53) dans l'intervalle  $\Delta t$  nous donne l'expression de  $\Delta\tau_c^s$  :

$$\Delta\tau_c^s = \sum_u h^{su} \Delta\gamma^u \text{signe}(\tau^u) \quad (\text{IV.56})$$

- Calcul des tenseurs  $N^{su}$  et  $Q^s$

Pour arriver à la formulation du système Forward Gradient de l'équation (IV.51), il nous reste à introduire les expressions de  $\Delta\tau^s$  et  $\Delta\tau_c^s$  dans l'équation (IV.50), ce qui conduit à l'équation suivante :

$$\Delta\gamma^s + \theta \Delta t \left[ \frac{\partial \dot{\gamma}^s}{\partial \tau^s} \Big|_t \sum_u \Delta\gamma^u \underline{R}^s : \underline{D}^u - \frac{\partial \dot{\gamma}^s}{\partial \tau_c^s} \Big|_t \sum_u h^{su} \Delta\gamma^u \text{signe}(\tau^u) \right] = \left[ \dot{\gamma}^s(t) + \theta \frac{\partial \dot{\gamma}^s}{\partial \tau^s} \Big|_t \underline{R}^s : \underline{D} \right] \Delta t \quad (\text{IV.57})$$

En introduisant les notations suivantes :

$$N^{su} = \delta^{su} + \theta \Delta t \left[ \frac{\partial \dot{\gamma}^s}{\partial \tau^s} \Big|_t \underline{R}^s : \underline{D}^u - \frac{\partial \dot{\gamma}^s}{\partial \tau_c^s} \Big|_t h^{su} \text{signe}(\tau^u) \right] \quad (\text{IV.58})$$

$$\underline{Q}^s = \theta \frac{\partial \dot{\gamma}^s}{\partial \tau^s} \Big|_t \underline{R}^s \quad (\text{IV.59})$$

La résolution du système différentiel de l'équation (IV.51) nous permet de calculer numériquement  $\Delta\gamma^s$  :

$$\Delta\gamma^s = \left[ f^s + \underline{F}^s : \underline{L} \right] \Delta t \quad (\text{IV.60})$$

Où les termes  $f^s$  et  $\underline{F}^s$  sont les solutions des deux systèmes linéaires suivants :

$$\sum_u N^{su} f^u = \dot{\gamma}^s(t) \quad (\text{IV.61})$$

$$\sum_u N^{su} \underline{F}^u = \underline{Q}^s \quad (\text{IV.62})$$

**c) Calcul des incréments de contrainte  $\Delta\sigma$ , de densités de dislocations  $\Delta\rho^s$ , et de rotation du réseau  $\Delta R$**

A l'instant  $t$ , une fois que  $\Delta\gamma^s$  a été calculé sur chaque système, il reste à calculer l'évolution de l'ensemble des variables du modèle par simple linéarisation. Naturellement, il vient d'abord que :

$$\gamma^s(t + \Delta t) = \gamma^s(t) + \Delta\gamma^s \quad (\text{IV.63})$$

- Incrément de contrainte  $\Delta\sigma$  :

L'incrément de contrainte  $\underline{\underline{\sigma}}(t + \Delta t)$  est également calculé de manière explicite, ce qui permet de faire apparaître  $\underline{\underline{\dot{\sigma}}}$  :

$$\underline{\underline{\sigma}}(t + \Delta t) = \underline{\underline{\sigma}}(t) + \underline{\underline{\dot{\sigma}}}(t)\Delta t \quad (\text{IV.64})$$

L'équation (IV.38) permet d'expliciter  $\underline{\underline{\dot{\sigma}}}$ , et l'expression de  $\underline{\underline{\sigma}}(t + \Delta t)$  devient :

$$\underline{\underline{\sigma}}(t + \Delta t) = \underline{\underline{\sigma}}(t) + \left[ \underline{\underline{C}}^e : \underline{\underline{D}} + \underline{\underline{W}} \underline{\underline{\tau}} - \underline{\underline{\tau}} \underline{\underline{W}} \right] \Delta t - \sum_s \Delta\gamma^s \underline{\underline{R}}^s \quad (\text{IV.65})$$

- Incrément de densité de dislocations  $\Delta\rho^s$  :

Par la même méthode et connaissant la loi d'évolution des densités de dislocations (équations (IV.14) & (IV.15)), on en déduit les densités de dislocations  $\rho^s$  à  $t + \Delta t$  :

$$\rho(t + \Delta t) = \rho(t) + \dot{\rho}(t)\Delta t \quad (\text{IV.66})$$

$$\rho(t + \Delta t) = \rho(t) + \frac{\Delta\gamma^s}{b} \left[ \frac{\sqrt{\sum_{u \neq s} \rho^u(t)}}{K} - g_c \rho^s(t) \right] \quad (\text{IV.67})$$

- Incrément de rotation du réseau  $\Delta R$  :

De même, il est possible de calculer l'incrément de rotation du réseau cristallin en utilisant l'équation (IV.39) pour exprimer  $\underline{\underline{\dot{R}}}(t)$  :

$$\underline{\underline{R}}(t + \Delta t) = \underline{\underline{R}}(t) + \underline{\underline{\dot{R}}}(t)\Delta t \quad (\text{IV.68})$$

$$\underline{\underline{R}}(t + \Delta t) = \underline{\underline{R}}(t) \left[ \underline{\underline{I}} + \left( \underline{\underline{W}} - \sum_s \dot{\gamma}^s(t) \underline{\underline{m}}^s \otimes_A \underline{\underline{n}}^s \right) \Delta t \right] \quad (\text{IV.69})$$

Le schéma d'intégration semi implicite est associé à une gestion automatique du pas de temps par le logiciel ABAQUS, ce qui permet de réduire ou d'augmenter la discrétisation en fonction du nombre d'itérations nécessaires pour compléter un incrément.

## IV.C Identification des paramètres du modèle

Le modèle choisi pour décrire le comportement de l'acier de cuve dans le domaine de transition fait intervenir un grand nombre de constantes matériau. Certains de ces paramètres



peuvent être déterminés à partir de données issues de la bibliographie ou à partir d'observations microstructurales. D'autres paramètres, tels que l'énergie libre d'activation  $\Delta G_0$ , peuvent être déterminés par des essais mécaniques spécifiques de sauts de vitesse et de sauts de température.

Cependant, certains coefficients intrinsèques à la loi de comportement jouent un rôle primordial dans la modélisation et ne sont pas accessibles directement par une approche expérimentale. Il faut alors déterminer ces paramètres en recherchant le jeu de valeurs qui accorde au mieux les résultats de la simulation numérique avec les données expérimentales : c'est la phase d'identification des paramètres du modèle.

#### IV.C.1 La procédure d'identification des paramètres

Nous avons utilisé le logiciel d'identification SiDoLo développé par Philippe Pilvin [CAI94], [PIL98]. La comparaison avec l'analyse expérimentale ne permet de caractériser que certaines variables du modèle : il s'agit des variables observables (ou mesurables) que nous noterons  $Z$ . Afin de simuler l'évolution de ces variables observables, il faut écrire la loi de comportement sous la forme d'un modèle explicite ou différentiel dans le logiciel SiDoLo, ou alors faire appel à un code de calcul extérieur. Pour calculer l'évolution des variables observables  $Z$ , nous avons utilisé le code éléments finis ABAQUS, dans lequel le modèle a déjà été implémenté en grandes transformations. SiDoLo est alors utilisé uniquement pour calculer l'écart entre expérience et simulation puis effectuer des itérations sur le jeu de paramètres.

La procédure d'identification consiste à minimiser une fonctionnelle  $L(A)$  qui mesure l'écart entre les grandeurs simulées par le modèle et les mêmes grandeurs mesurées expérimentalement. Des itérations successives sont réalisées sur le jeu de paramètres jusqu'à ce que l'écart atteigne un minimum local ou alors, jusqu'à ce que le nombre maximal d'itérations sur les paramètres soit atteint. La base expérimentale est en général constituée de plusieurs essais (ici  $N$ ) correspondant à différentes conditions expérimentales (type de sollicitation, vitesse de chargement, température) :

$$L(A) = \sum_{n=1}^N L_n(A) \quad (\text{IV.70})$$

Où  $L_n(A)$  désigne la fonctionnelle associée à l'essai  $n$  :

$$L_n(A) = \frac{I}{t_1 - t_0} \int_{t_0}^{t_1} (Z_s(A) - Z_s^*)^T D_n (Z_s(A) - Z_s^*) dt \quad (\text{IV.71})$$

Avec les notations suivantes :

- $(t_0, t_1)$  : intervalle de temps de l'essai  $n$  ;
- $Z_s(A)$  : variable simulée pour le jeu de paramètre  $A$  et l'essai  $n$  ;
- $Z_s^*$  : variable expérimentale pour l'essai  $n$  ;
- $D_n$  : matrice de pondération associée à l'essai  $n$ .

La matrice de pondération est une matrice diagonale permettant de prendre en compte l'incertitude de mesure dans la procédure d'identification. Chaque coefficient de  $D_n$  est associé à une variable observable et égal au carré de l'inverse de l'erreur de mesure. La

matrice de pondération permet de donner plus de poids aux variables mesurées avec une incertitude plus faible.

En réalité, le calcul de la fonctionnelle  $L_n(A)$  est approché par une somme finie où l'écart n'est calculé qu'aux  $M_n$  instants  $t_i$  d'observation de la variable expérimentale  $Z_s^*$ .

$$L_n(A) = \frac{1}{M_n} \sum_{i=1}^{M_n} [Z_s(A, t_i) - Z_s^*(t_i)]^r D_n [Z_s(A, t_i) - Z_s^*(t_i)] \quad (\text{IV.72})$$

L'identification a été réalisée sur une base expérimentale constituée de 4 essais de traction simple réalisés à 25°C, -90°C, -150°C et -196°C et à  $\dot{\epsilon} = 5 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ . Afin de donner un poids égal à chaque courbe expérimentale, la matrice de pondération a été fixée à une même valeur arbitraire pour tous les essais. Le calcul de l'écart entre expérience et simulation porte sur la composante axiale de la contrainte de Cauchy  $\sigma_{11}$  exprimée à 500 instants  $t_i$  de l'acquisition des courbes expérimentales.

L'interface entre SiDoLo et le code d'éléments finis ABAQUS fonctionne de la manière suivante (cf. figure IV.4) :

- Tous les calculs sont réalisés sur un même agrégat massif de forme cubique comportant 512 orientations cristallographiques représentatives de la texture isotrope du matériau. Chaque 'grain' comporte 8 éléments, si bien que l'agrégat est constitué de 4096 éléments ;
- Lors de la première étape de l'identification, un jeu de paramètres est entré initialement dans le logiciel SiDoLo. L'interface génère 4 simulations d'agrégat dans ABAQUS qui correspondent aux 4 températures 25, -90, -150 et -196°C. A la fin de la simulation, les courbes  $\sigma_{11} = f(t)$  sont enregistrées dans un fichier à l'aide d'un script écrit en langage Python. Ces données sont interprétées par SiDoLo qui calcule ensuite la fonction écart entre les 4 simulations numériques et les 4 courbes expérimentales correspondantes ;
- Au cours des étapes 2 à  $N$ , les simulations sont relancées en perturbant successivement chacun des  $N$  paramètres à identifier. Pour chaque paramètre, l'écart expérience / simulation est calculé de la même manière que précédemment ;
- En fonction des écarts obtenus à l'étape  $N$ , SiDoLo évalue l'influence de chacun des paramètres sur la réponse du modèle et propose un nouveau jeu de paramètres à l'étape  $N+1$  ;
- Finalement, pour affiner ce nouveau jeu de paramètres, SiDoLo réalise une nouvelle série d'itérations sur les paramètres 1 à  $N$  jusqu'à ce qu'un minimum local soit atteint, ou alors jusqu'à ce que le nombre maximal d'itérations (fixé à 20) soit atteint.

Cette démarche a tout d'abord été appliquée en l'état afin de déterminer un premier jeu de paramètres satisfaisant les résultats expérimentaux.

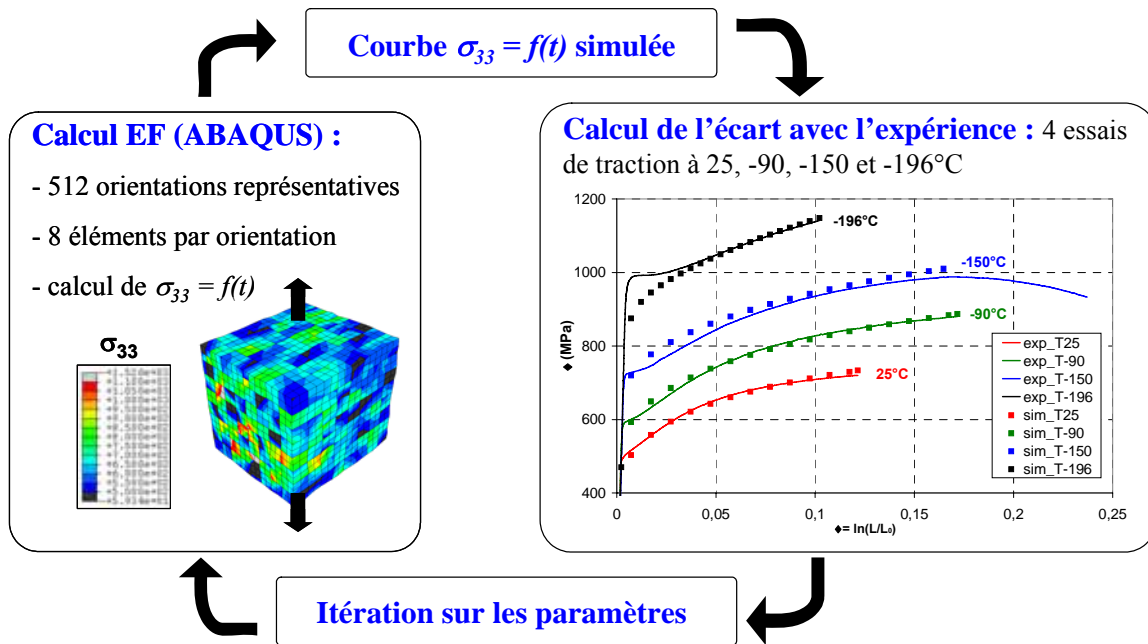


Fig. IV.4 : Principe de l'identification inverse : interface SiDoLo / ABAQUS

#### IV.C.2 Etude préliminaire : identification des paramètres à l'aide du modèle d'homogénéisation de Berveiller-Zaoui

Dans un premier temps, l'objectif a consisté à vérifier que l'on peut trouver un jeu de paramètres satisfaisant les essais mécaniques réalisés à différentes températures. Nous verrons que cette démarche d'identification s'avère insuffisante et qu'il convient de déterminer un maximum de paramètres autrement que par identification inverse.

Au cours de cette identification, afin au lieu de réaliser des calculs de microstructure avec le code ABAQUS, nous avons utilisé un modèle d'homogénéisation de type Berveiller-Zaoui sur 500 orientations représentatives d'une texture isotrope. Le modèle différentiel est intégré directement à SiDoLo. L'utilisation d'un calcul d'homogénéisation nous a permis de déterminer un premier jeu de paramètres avant de mettre en place l'interface entre SiDoLo et ABAQUS. Toutefois, le calcul d'homogénéisation ne permet pas de prendre en compte de façon réaliste les relations de voisinage entre les orientations cristallographiques.

Le jeu de paramètres initial a été déterminé en se basant sur les hypothèses suivantes :

- $\dot{\gamma}_0$  a été fixé à  $10^6 \text{ s}^{-1}$ . D'après la littérature ([STA02], [BER04]), les valeurs doivent être comprises entre  $10^6$  et  $10^{11}$ ,  $\dot{\gamma}_0 = 10^6 \text{ s}^{-1}$  conduisant à une meilleure stabilité de l'intégration numérique ;
- Les valeurs initiales des paramètres liés à l'activation thermique  $\Delta G_0$ ,  $\tau_R$ ,  $p$  et  $q$  ont été fixées d'après les données bibliographiques ([UEN03], [UET03]). Toutefois, ces paramètres sont laissés libres au cours de l'identification.
- De plus, nous n'avons pas pris en compte la non-équivalence entre les systèmes de glissement  $\{110\}$  et  $\{112\}$ . Le paramètre  $\tau_0$  est ici une constante qui ne dépend ni du

type de système ni de  $T$ . La valeur initiale de  $\tau_0$  est fixée d'après les résultats de la thèse de Sekfali [SEK04] ;

- Dans un souci de simplification, la matrice d'interaction  $a^{su}$  a été supposée isotrope. Tous les coefficients ont été fixés à 0,25. L'érouissage latent n'a pas été pris en compte : même s'il joue un rôle important en début de plasticité, il a été montré que son effet sur l'érouissage s'estompe au-delà des premiers % de déformation plastique équivalente [ERI03].
- La valeur initiale du paramètre  $K$  est fixée à 8 d'après les données bibliographiques disponibles concernant la modélisation des aciers faiblement alliés pour  $T > T_a$  [SEK04]. On a supposé dans un premier temps que ce paramètre ne dépend pas de  $T$ , ce qui constitue une hypothèse très simpliste ;
- Le paramètre  $g_c$  est figé à 8 nm, ce qui correspond à la valeur utilisée pour la modélisation à  $T > T_a$ . Là encore, le choix de prendre  $g_c$  indépendant de  $T$  est contestable d'un point de vue théorique ;
- La taille de grain a été fixée à 15  $\mu\text{m}$ , ce qui correspond à la taille moyenne des paquets de lattes dans le matériau bainitique. Si les dislocations peuvent traverser les joints de lattes faiblement désorientés, on considère donc en revanche que, les interfaces entre paquets constituent des obstacles infranchissables.

Les résultats de l'identification sont donnés dans le tableau IV.1. Le premier tableau contient les paramètres associés à la loi d'écoulement tandis que le second recense tous ceux qui sont liés à la loi d'érouissage.

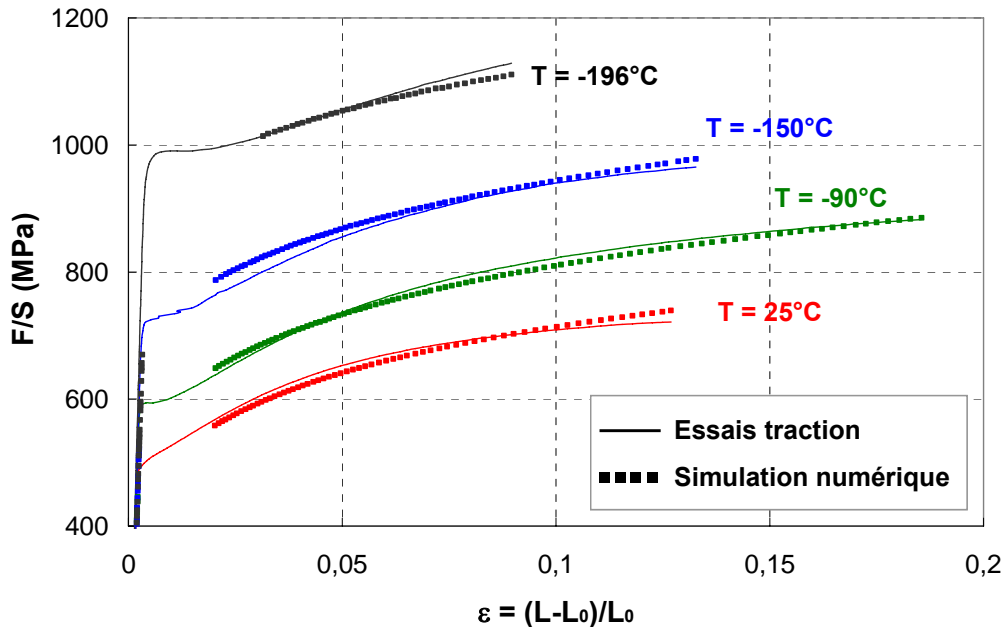
	$\dot{\gamma}_0$ ( $\text{s}^{-1}$ )	$\Delta G_0$ (eV)	$\tau_R$ (MPa)	$p$	$q$
<b>initial</b>	$10^6$	0,700	400	0,5	1,5
<b>final</b>		0,770	498	0,335	1,12

	$\tau_0$ (MPa)	$a^{ss}$	$a^{su}$	$\rho_0$ ( $\text{m}^{-2}$ )	$K$	$g_c$ (nm)	$D_{\text{grain}}$ ( $\mu\text{m}$ )
<b>initial</b>	150	0,25	0,25	$3,6 \cdot 10^{13}$	8	8	15
<b>final</b>	132			$2,4 \cdot 10^{13}$	22,9		

**Tableau IV.1 :** Jeux de paramètres initial et final associés à la première identification (paramètres fixés en rouge)

La figure II.2 montre un bon accord entre les courbes expérimentales et les courbes simulées avec le jeu de paramètre final. Lors de l'identification, le début des courbes de traction n'a pas été pris en compte en raison des paliers de type Lüders qui apparaissent à  $-90^\circ\text{C}$ ,  $-150^\circ\text{C}$  et  $-196^\circ\text{C}$ . L'écart entre expérience et simulation est inférieur à 15 MPa, excepté à  $-150^\circ\text{C}$  en début de courbe. Il est donc possible de trouver un jeu de paramètres satisfaisant à la fois un certain nombre d'hypothèses 'raisonnables' (basées sur les données dont nous disposons) et s'accordant avec la base de données expérimentale.

Cependant, en raison du caractère limité de la base expérimentale et du grand nombre de paramètres matériau, il faut que l'identification porte sur aussi peu de paramètres que possible, sans quoi plusieurs jeux de paramètres très différents pourraient satisfaire les résultats expérimentaux : dans ce cas le modèle de comportement perdrait de son sens physique.



**Fig. IV.5:** Comparaison des courbes expérimentales de traction simple avec les courbes numériques obtenues avec le jeu de paramètres final

Nous avons fait varier 7 paramètres lors de l'identification, et il est tout à fait possible de trouver un jeu de paramètres totalement différent qui s'accorderait avec les essais mécaniques. Cela ne pose pas de problème particulier pour certains paramètres n'ayant pas de signification physique particulière et ne jouant pas de rôle prépondérant sur l'écroutissage local du matériau. On peut citer l'exemple des paramètres d'activation thermique  $\dot{\gamma}_0$ ,  $\tau_R$ ,  $p$  et  $q$  qui ne jouent que sur la contrainte effective, et contribuent donc surtout à décaler la contrainte d'écoulement.

L'énergie libre d'activation  $\Delta G_0$  revêt une plus grande signification physique, puisqu'elle correspond à une valeur limite de l'énergie d'activation dans le domaine athermique. Comme les valeurs  $\Delta G$  ont été mesurées expérimentalement, il faut dans la mesure du possible imposer dans le modèle une valeur de  $\Delta G$  donnée par l'expérience.

Les constantes  $\rho_0$ ,  $D_{grain}$ ,  $K$  et  $g_c$  commandent l'évolution des densités de dislocations et il apparaît crucial d'obtenir des informations expérimentales sur ces paramètres, sans quoi il est tout à fait possible d'obtenir plusieurs jeux de constantes matériau équivalentes en ce qui concerne la réponse macroscopique du modèle, mais conduisant à des réponses différentes à l'échelle microscopique.

Par conséquent, notre démarche consiste à mettre en place une procédure d'identification en imposant un maximum de contraintes sur les paramètres, et ainsi de voir s'il est possible d'identifier un jeu de paramètres qui soit en accord avec l'ensemble des données bibliographiques et expérimentales.

La démarche d'identification doit donc répondre aux impératifs suivants :

- Il faut utiliser les valeurs de  $\Delta G_0$  et  $\rho_0$  mesurées expérimentalement (cf. chapitre III). Les observations en microscopie électronique en transmission donnent également des informations sur le libre parcours moyen des dislocations, qui est relié au paramètre  $K$  dans la loi d'écrouissage.
- Il faut déterminer les paramètres candidats pour l'identification inverse. Ces paramètres doivent remplir les 2 conditions suivantes : ils ne sont pas mesurables et ils influent grandement sur le comportement microscopique, ce qui rend leur identification nécessaire.

Les chapitre IV.C.3 et IV.C.4 décrivent les étapes du processus d'identification en détaillant les étapes conduisant au jeu de paramètres final.

### IV.C.3 Identification des paramètres à $K$ et $g_c$ fixés

Compte tenu des résultats de la première étape identification, nous avons naturellement réalisé une identification en intégrant les valeurs de  $\Delta G_0$  et  $\rho_0$  déterminées expérimentalement. Les modifications suivantes ont été entreprises :

- Le modèle d'homogénéisation de type Berveiller-Zaoui a été remplacé par l'interface SiDoLo / ABAQUS pour calculer la réponse simulée.
- Le phénomène de non équivalence des plans de glissements  $\{110\}$  et  $\{112\}$  a été introduit dans le modèle suivant la démarche décrite au début du chapitre IV.
- Nous avons également entrepris d'identifier  $K$  à partir des observations au MET. Les clichés montrent que les dislocations ne franchissent pas les interfaces entre les lattes. Le libre parcours moyen initial  $A_0$  a donc été pris de l'ordre de deux fois l'espace interlattes (facteur géométrique). Or si on considère la loi d'évolution des densités de dislocations,  $A_0$  peut être relié à la densité de dislocations totale  $\rho_0$  par la relation :

$$\frac{l}{A_0} = \frac{l}{D_{latte}} + \frac{\sqrt{\rho_0}}{K(T)} \quad (\text{IV.73})$$

ce qui correspond, pour  $\rho_0 = 10^{14} \text{ m}^{-2}$  à  $K = 25$  ;

- Les paramètres  $\rho_0$  et  $\Delta G_0$  ont été figés à  $10^{14} \text{ m}^{-2}$  et 1,00 eV respectivement.
- Nous fixons le paramètre  $\tau_R$  à la valeur identifiée dans le chapitre IV.C.2 :  $\tau_R = 498 \text{ MPa}$ .

Il ne reste plus que 4 paramètres à identifier :  $\tau_0$ ,  $a^{ss}$ ,  $p$  et  $q$ .

	$\tau_0$ (MPa)	$a^{ss}$ $a^{su}$	$\rho_0$ (m <sup>-2</sup> )	$K$	$g_c$ (nm)	$D_{latte}$ (μm)
<b>initial</b>	132	0,25	1,0 10 <sup>14</sup>	25	8	2
<b>final</b>	91,3	0,294				

	$\dot{\gamma}_0$ (s <sup>-1</sup> )	$\Delta G_0$ (eV)	$\tau_R$ (MPa)	$p$	$q$
<b>initial</b>	10 <sup>6</sup>	1,00	498	0,335	1,12
<b>final</b>				0,283	1,17

**Tableau IV.2** : Jeux de paramètres initial et final associés à la deuxième identification (paramètres fixés en rouge).

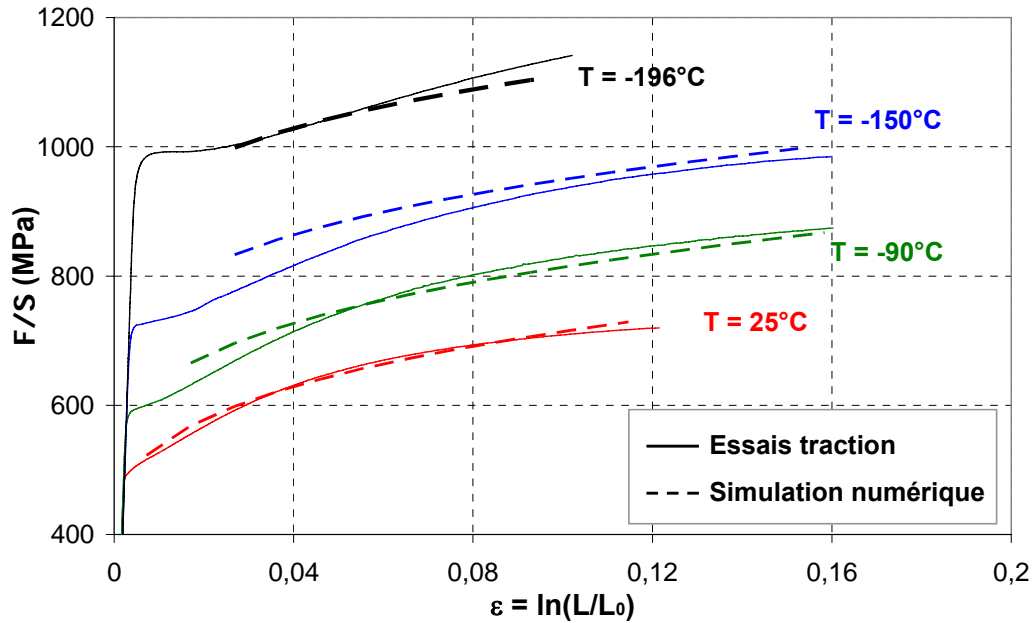
L'identification conduit à une valeur finale de  $\tau_0$  beaucoup plus faible que la valeur initiale. Cela peut s'expliquer par le choix d'une densité de dislocations initiale de 10<sup>14</sup> m<sup>-2</sup>, qui est sensiblement plus élevée que celle trouvée lors de la première identification.

L'accord entre expérience et simulation est légèrement moins bon que lors de la première identification :

- A 25°C et -90°C, l'accord entre expérience et simulation est toujours aussi satisfaisant que lors de la première identification ;
- A -150°C, la réponse simulée est très nettement au dessus de la réponse expérimentale, surtout en début de déformation ;
- A -196°C, la simulation tend à s'écarter de la courbe expérimentale à mesure que  $\varepsilon$  augmente : le modèle ne reproduit pas l'écrouissage linéaire observé expérimentalement.

Deux raisons peuvent expliquer cette moins bonne adéquation entre le modèle et l'expérience :

- Tout d'abord, l'identification a été réalisée en imposant un grand nombre de contraintes (7 paramètres figés), ce qui n'était pas le cas lors de l'étape précédente ;
- D'autre part, les paramètres  $K$  et  $g_c$  ont été considérés comme étant indépendants de la température, ce qui signifierait que les mécanismes de multiplication et d'annihilation des dislocations n'évoluent pas dans le domaine de la transition de comportement plastique. Or cette hypothèse est clairement en contradiction avec la littérature [LOU78].



**Fig. IV.6 :** Comparaison des courbes de traction simple expérimentales et simulées obtenues avec le nouveau jeu de paramètres

Nous avons ainsi choisi d'introduire une dépendance de  $K$  et  $g_c$  en température dans la version définitive du modèle. Les mécanismes de multiplication des dislocations étant mal connus à basse température, la solution la plus simple consiste à postuler que l'efficacité des sources de dislocations varie en fonction de la température. Concernant le paramètre  $g_c$ , l'introduction d'une dépendance en température est justifiée par le caractère thermiquement activé du mécanisme de glissement dévié.

Cette identification montre, qu' en imposant un grand nombre de contraintes d'optimisation , on obtient malgré tout un jeu de paramètres relativement satisfaisant.

#### IV.C.4 Introduction d'une dépendance de $K$ et $g_c$ en température

Afin d'améliorer la pertinence de la paramétrisation, nous sommes proposés d'introduire une dépendance en température en identifiant  $K$  par méthode inverse séparément à chaque température au lieu d'évaluer une valeur de  $K$  à partir du libre parcours moyen initial. Le paramètre  $g_c$  est relié au mécanisme d'annihilation qui fait intervenir le mécanisme de glissement dévié. C'est pourquoi nous avons choisi une loi activée thermiquement pour décrire la dépendance de  $g_c$  en température.

##### a) Etude préalable de l'influence de $K$ et $g_c$

Nous avons vu que l'accord expérience / simulation était perfectible pour  $T = -196^\circ\text{C}$  et  $T = -150^\circ\text{C}$ . L'identification de  $K$  et  $g_c(T)$  nécessite la détermination de six paramètres matériau. C'est pourquoi, dans un premier temps, nous nous sommes intéressés à l'effet de ces deux paramètres sur l'écroutissage ainsi qu'à leur signification physique.



A -196°C, le modèle ne parvient pas à reproduire l'écroissage linéaire observé sur la courbe de traction simple. Est il possible de modifier la paramétrisation de façon à reproduire cette dépendance linéaire ?

Dans le sous chapitre IV.A, on a vu que la relation entre la contrainte d'écoulement et la densité de dislocations tendait vers une dépendance linéaire dans le régime 'basse température'.

$$\tau^s = \tau_{eff}^s + \frac{(\mu b)^2 \sum a^{su} \rho^u}{\tau_{eff}^s} \quad (IV.74)$$

Pour que l'écroissage soit linéaire, il faut que la loi d'évolution de  $\rho^s$  dépende linéairement de  $\dot{\gamma}^s$ . Or cette condition est vérifiée lorsque  $K$  tend vers l'infini et  $g_c$  vers 0 :

$$\dot{\rho}^s = \frac{|\dot{\gamma}^s|}{b} \frac{1}{D_{grain}} \quad (IV.75)$$

La réalisation de ces deux conditions semble tout à fait plausible à -196°C : d'un côté, la faible mobilité des segments de dislocations vis contrarie les mécanismes classiques de multiplication des dislocations, tandis que le mécanisme d'annihilation se produit moins souvent du fait de sa nature thermiquement activée. Dans un premier temps, nous avons ainsi choisi d'identifier le modèle à -196°C et en fixant les paramètres de la façon suivante :

- $K$  est fixé à  $10^6$  de sorte que le terme de sources de dislocations ne dépende plus que de  $D_{grain}$  ;
- le paramètre  $g_c(T)$  a été fixé à 0 nm de manière à faire disparaître le terme d'annihilation dans la loi d'évolution de  $\rho_s$  ;
- seuls les paramètres  $\tau_0$  et  $a^{ss}$  sont laissés libres par rapport à l'étape précédente.

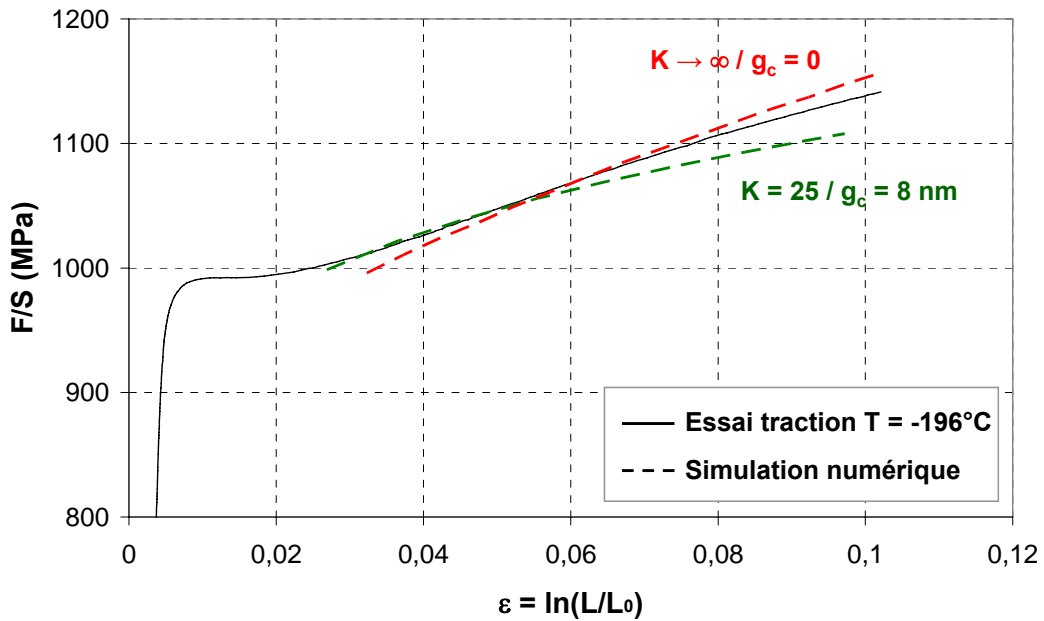
	$\tau_0$ (MPa)	$a^{ss}$	$a^{su}$	$\rho_0$ (m <sup>-2</sup> )	$K$	$g_c$ (nm)	$D_{grain}$ (µm)
<b>initial</b>	91,3	0,294					
<b>final</b>	88,9	0,251		1,0 10 <sup>14</sup>	10 <sup>6</sup>	0	2

**Tableau IV.3 :** Identification d'un jeu de paramètres associé au comportement à T = -196°C (paramètres fixés en rouge)

La Figure IV.7 montre que l'accord entre expérience et simulation est nettement amélioré entre  $\varepsilon = 4\%$  et jusqu'à 10%. La courbe simulée suit une tendance linéaire et elle ne s'infléchit pas en fin d'essai. On en conclut que la paramétrisation 'extrême' ( $K \rightarrow \infty, g_c = 0$ ) s'accorde mieux aux données expérimentales que le couple de paramètres ( $K = 25, g_c = 8$  nm) utilisé classiquement à  $T = 25^\circ\text{C}$ .

Nous avons donc une idée assez claire sur la tendance que doivent suivre  $K$  et  $g_c$  dans les deux régimes extrêmes 'haute température' ( $T = 25^\circ\text{C}$ ) et 'basse température' ( $T = -196^\circ\text{C}$ ). Il faut s'attendre à voir  $K$  augmenter et inversement  $g_c(T)$  diminuer lorsque  $T$  décroît. La tendance

que suit le modèle est bien en accord avec les données théoriques dont nous disposons sur l'écroissage du fer- $\alpha$  à basse température.



**Fig. IV.7 :** Comparaison de la courbes expérimentale de traction simple à  $T = -196^{\circ}\text{C}$  avec les courbes numériques avec différentes valeurs de  $K$  et  $g_c$

Il reste maintenant à déterminer un jeu de paramètres cohérent du point de vue théorique et qui s'accorde avec l'ensemble des essais mécaniques.

### b) Identification d'une dépendance de $g_c$ et $K$ en température

Suite à l'étude réalisée à  $-196^{\circ}\text{C}$ , nous avons choisi d'identifier  $K$  et  $g_c$  en deux étapes :

- Dans un premier temps, on identifie le paramètre  $g_c(T)$  en gardant tous les autres paramètres y compris  $K$  qui est fixé à 25 ;
- Ensuite, la valeur de  $g_c$  est fixée et  $K$  est identifié séparément pour chaque température.

Nous utilisons l'expression suivante pour décrire la loi d'évolution  $g_c(T)$  :

$$g_c(T) = g_{c0} \exp\left[-\frac{E_{gc}}{k_B T}\right] \quad (\text{IV.76})$$

Cette loi est pleinement définie par les 2 paramètres  $g_{c0}$  et  $E_{gc}$ . Toutefois, nous avons choisi de rajouter la contrainte d'optimisation suivante : comme les mécanismes d'écroissage 'haute température' et la valeur de  $g_c$  à  $T = 25^{\circ}\text{C}$  sont déjà bien documentés dans la littérature, nous avons imposé que  $g_c$  soit toujours égal à 8 nm à  $25^{\circ}\text{C}$ , ce qui revient à introduire une équation liant  $g_{c0}$  et  $E_{gc}$ . Tout se passe donc comme si on n'identifiait qu'un seul paramètre. Compte

tenu des résultats obtenus dans le chapitre précédent, nous devons vérifier que la valeur trouvée pour  $g_c$  soit proche de la valeur 'limite' 0 à  $-196^\circ\text{C}$ .

Le jeu initial de paramètres  $g_{c0} = 8 \text{ nm}$  et  $E_{gc} = 0$  correspond naturellement au cas où  $g_c$  ne dépend pas de la température et vaut 8 nm.

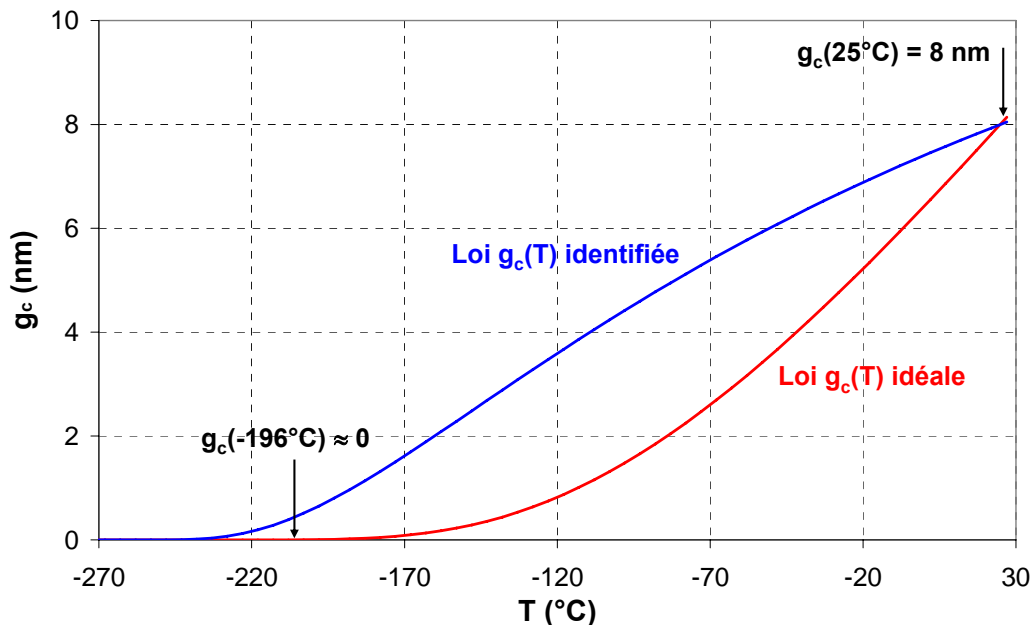
L'identification de  $g_c(T)$  à  $25^\circ\text{C}$ ,  $-90^\circ\text{C}$ ,  $-150^\circ\text{C}$  et  $-196^\circ\text{C}$  conduit aux résultats suivants :

- $g_c(25^\circ\text{C}) = 8,00 \text{ nm}$  ;
- $g_c(-90^\circ\text{C}) = 4,70 \text{ nm}$  ;
- $g_c(-150^\circ\text{C}) = 2,40 \text{ nm}$  ;
- $g_c(-196^\circ\text{C}) = 0,70 \text{ nm}$ .

Cette loi est fortement dépendante de la température. A  $-196^\circ\text{C}$ , la valeur identifiée est proche de 0 quoique légèrement supérieure. Sur la figure 5, la loi  $g_c(T)$  est comparée à la loi qu'on obtiendrait en imposant  $g_c(-196^\circ\text{C}) = 0$  et  $g_c(25^\circ\text{C}) = 8 \text{ nm}$ . Cette paramétrisation extrême de la loi est pratique, mais s'éloigne très fortement de la celle qui a été identifiée dans le domaine de température intermédiaire. L'identification conduit à des résultats proches de ceux escomptés à  $-196^\circ\text{C}$ , mais se justifie par la nécessité de bien décrire l'érouissage aux températures intermédiaires.

	$\tau_0$ (MPa)	$a^{ss}$	$a^{su}$	$\rho_0$ ( $\text{m}^{-2}$ )	$K$	$g_{c0}$ (nm)	$E_{gc}$ (eV)	$D_{grain}$ ( $\mu\text{m}$ )
<b>initial</b>						8	0	
<b>final</b>	88,9	0,251		$1,0 \cdot 10^{14}$	25	18,6	$2,17 \cdot 10^{-2}$	2

**Tableau IV.4 :** Résultats de l'identification de  $g_c(T)$  (paramètres fixés en rouge)



**Fig. IV.8 :** Comparaison de la loi  $g_c(T)$  identifiée par méthode inverse avec celle qu'on obtiendrait en imposant  $g_c(-196^\circ\text{C}) = 0$

Une fois  $g_c$  déterminé, on procède à la deuxième étape qui consiste à identifier le paramètre  $K(T)$  séparément sur chaque courbe expérimentale.

	$K(25^{\circ}\text{C})$	$K(-90^{\circ}\text{C})$	$K(-150^{\circ}\text{C})$	$K(-196^{\circ}\text{C})$
<b>initial</b>	25			
<b>final</b>	35,6	63,8	323,1	449,9

**Tableau IV.5** : Résultats de l'identification de  $K(T)$

La valeur initiale est fixée à  $K=25$ . Cette dernière étape permet de reproduire correctement la pente d'érouissage des courbes de traction à  $-196^{\circ}\text{C}$ . A  $-150^{\circ}\text{C}$ , l'écart relatif entre expérience et simulation est inférieur à 2 % sauf entre  $\varepsilon = 3$  % (début de l'intervalle d'identification) et 5 %. Cependant, dans le cadre de la prédiction de la rupture, et compte tenu des hypothèses faites sur la matrice d'érouissage, il n'est pas réaliste de chercher à reproduire fidèlement le comportement plastique en début de déformation.

On remarque d'autre part que la paramétrisation du paramètre  $K$  dépend fortement de  $T$ . La valeur identifiée à  $25^{\circ}\text{C}$  reste du même ordre de grandeur que celle initialement postulée ( $K = 25$ ). A  $-196^{\circ}\text{C}$ ,  $K$  augmente d'un ordre de grandeur par rapport à  $25^{\circ}\text{C}$ , ce qui reste très significatif. Cette forte évolution de  $K$  traduit l'existence de 3 domaines de comportement se manifestant successivement aux différentes températures :

- A  $25^{\circ}\text{C}$ , un domaine de comportement 'haute température' caractérisé par une prédominance de l'érouissage forêt : les sources de dislocations sont très nombreuses, ce qui se traduit par une valeur de  $K$  de l'ordre de 20 à 40 ;
- A  $-90^{\circ}\text{C}$ , une transition s'amorce vers un régime de comportement 'basse température' : la mobilité des dislocations décroît et les sources de dislocations sont moins efficaces, d'où une forte augmentation de  $K$ .
- A  $-150^{\circ}\text{C}$  et  $-196^{\circ}\text{C}$ , les valeurs de  $K$  sont encore beaucoup plus élevées, de l'ordre d'un facteur 10. L'érouissage devient progressivement contrôlé par la taille de la microstructure. Ce phénomène, combiné à une extinction du mécanisme d'annihilation, conduit à un phénomène d'érouissage linéaire à  $-196^{\circ}\text{C}$  qui a été observé par Rauch [RAU93] puis confirmé expérimentalement.

La paramétrisation de  $K(T)$  et  $g_c(T)$  modifie le 'rapport de forces' entre les termes de sources et d'annihilation dans la loi d'évolution de  $\rho_s$  lorsque  $T$  décroît. Cette compétition permet d'interpréter le fait que la déformation à striction augmente entre  $25^{\circ}\text{C}$  et  $-90^{\circ}\text{C}$  et diminue entre  $-90^{\circ}\text{C}$  et  $-150^{\circ}\text{C}$ .

Entre  $25^{\circ}\text{C}$  et  $-90^{\circ}\text{C}$ , le terme d'annihilation est presque divisé par deux : il en va de même pour le terme de production, puisque le paramètre  $K$  est multiplié approximativement par deux : si on suppose que les dislocations évoluent identiquement à  $25$  et  $-90^{\circ}\text{C}$ , cela signifie que l'érouissage sature à peu près similairement à ces deux températures.

Aux températures plus basses, cette tendance tend à s'inverser :  $K$  est multiplié par 5 entre  $-90^{\circ}\text{C}$  et  $-150^{\circ}\text{C}$ , ce qui signifie que l'efficacité des sources de dislocations est grandement atténuée. Le terme  $g_c$  n'est quant à lui que divisé par deux : en conséquence, la pente d'écroutissage diminue et l'apparition de la striction est plus précoce.

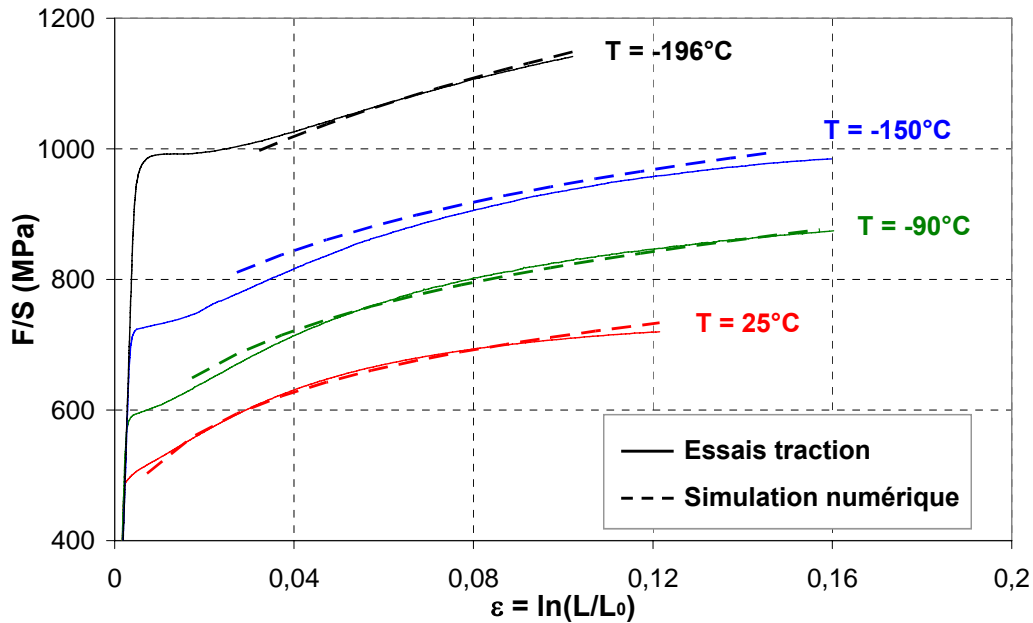


Fig. IV.9 : Comparaison des courbes expérimentales et simulées à la fin du processus d'identification

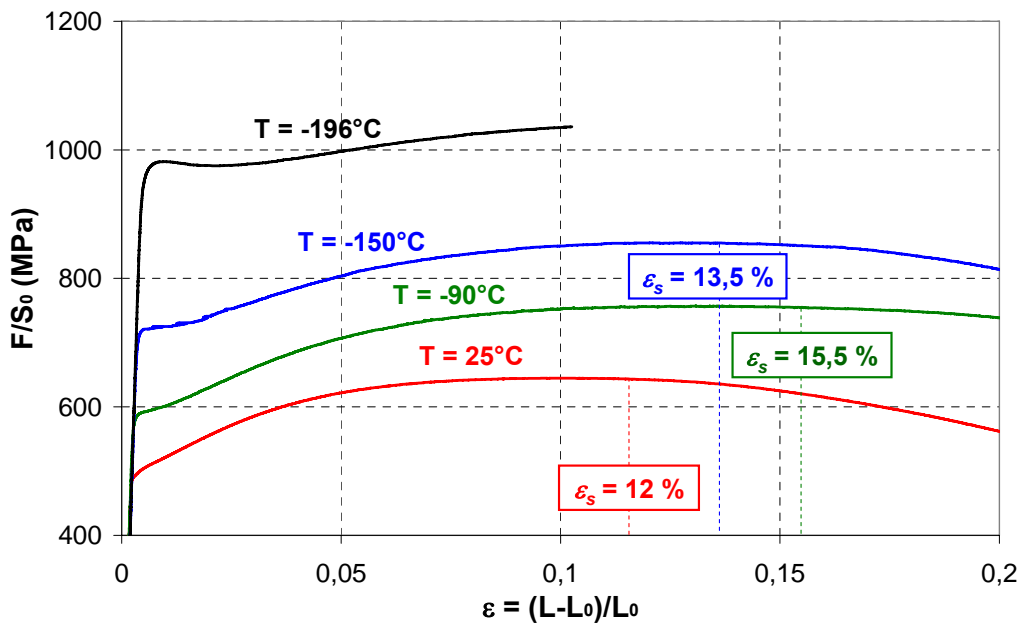


Fig. IV.10 : Evolution de la déformation à striction  $\varepsilon_s$  mesurée sur les courbes de traction expérimentales

#### IV.C.5 Proposition d'une procédure d'identification optimisée

Les chapitres IV.C.2, IV.C.3 et IV.C.4 ont montré comment la procédure d'identification des paramètres a été mise en place et comment cette procédure a été progressivement optimisée. La démarche d'identification a été appliquée au matériau bainitique. Nous souhaitons maintenant appliquer la démarche d'identification à un autre matériau, par exemple à la microstructure martensitique. Un certain nombre de paramètres peuvent être repris à partir des résultats obtenus avec la microstructure bainitique. D'autres paramètres doivent en revanche être réidentifiés. Quels sont les paramètres à fixer, ceux à déterminer expérimentalement et ceux à modifier ? Dans quel ordre peut-on réaliser l'identification de manière à réduire le nombre d'étapes et à simplifier la procédure ?

Tout d'abord, en ce qui concerne les paramètres de la loi d'écoulement, nous pouvons utiliser les résultats des essais de sauts de vitesse pour fixer un certain nombre de paramètres. Les mesures de volume d'activation ont montré qu'il n'y avait pas d'effet significatif de la microstructure sur les mécanismes d'activation thermique, ce qui amène à faire les hypothèses suivantes :

- $\dot{\gamma}_0$  est fixé à  $10^6$  dans la martensite comme dans la bainite ;
- La valeur de  $\Delta G_0$  est également fixée à partir des essais de sauts de vitesse et de sauts de température.  $\Delta G_0$  est pris égal à  $\Delta G$  (25°C), c'est-à-dire 1,17 eV. S'il fallait identifier sur une autre microstructure bainitique légèrement différente de la nuance A508 Cl3 et pour laquelle nous ne disposons pas de données expérimentales, nous aurions gardé  $\Delta G_0 = 1$  eV ;
- Le paramètre  $\tau_R$  est supposé indépendant de la microstructure. Il reste donc figé à 498 MPa ;
- $p$  et  $q$  sont des constantes d'ajustement. Il faut donc les identifier dans un premier temps.

L'identification des paramètres de la loi d'écrouissage est bien entendu plus complexe car le nombre d'inconnues est plus grand. Cependant, certains résultats d'identification peuvent être transposés de la bainite à la martensite :

- Dans un premier temps, il semble nécessaire d'identifier  $\tau_0$  car il a été montré que ce paramètre est très sensible à la finesse de la microstructure [SEK04] ;
- La valeur de  $\rho_0$  a été fixée à  $10^{14}$  m<sup>-2</sup> dans la martensite : les résultats ont montré qu'il n'y avait pas de différence entre les 2 microstructures ;
- La taille de latte  $D_{grain}$  est fixée à 2  $\mu$ m, ce qui correspond à la taille moyenne des paquets de lattes du matériau martensitique. Il s'agit de l'entité cristallographique la plus petite que l'on peut représenter dans l'agrégat (taille de maillage  $\approx$  0,5  $\mu$ m). Les calculs par éléments finis ne permettent pas d'accéder aux hétérogénéités à l'échelle de la latte

de martensite. C'est pour cette raison que nous ne comptons pas prendre une valeur de  $D_{grain}$  de l'ordre de l'épaisseur de latte ;

- $K$  est fixé à 25 dans un premier temps.  $K$  sera par la suite identifié indépendamment à chaque température ;
- La loi  $g_c(T)$  identifiée sur le comportement de la bainite peut être transposée à la martensite car la distance d'annihilation est largement inférieure à la taille de latte : la microstructure est supposée ne pas interférer avec le mécanisme d'annihilation.

Compte tenu de toutes ces remarques, l'identification peut être optimisée en 2 étapes distinctes :

- Premièrement, une identification est réalisée à 25°C, -90°C, -150°C et -196°C sur les paramètres  $\tau_0$ ,  $a^{su}$ ,  $p$  et  $q$ .  $K$  est fixé à 25 tandis que  $\dot{\gamma}_0$ ,  $\Delta G_0$ ,  $\tau_R$ ,  $\rho_0$ ,  $g_c$ , et  $D_{grain}$  sont fixés une fois pour toutes. Cette première identification sert surtout à recalibrer  $\tau_0$ , qui est censé être plus élevé dans la martensite que dans la bainite.  $a^{su}$  est réidentifié car les variations de pente d'écrouissage peuvent affecter sensiblement ce paramètre. Il est souhaitable de restreindre les bornes de variation des paramètres  $p$  et  $q$  de 15 à 20 % autour de la valeur initiale car les mécanismes d'activation ne doivent pas être profondément modifiés entre bainite et martensite.
- Par la suite, le paramètre  $K$  peut être ré-identifié séparément sur chaque essai de traction, afin d'améliorer l'accord entre expérience et simulation d'une part, et d'autre part pour déduire une paramétrisation  $K(T)$  propre à la microstructure martensitique. En effet, les observations réalisées au MET suggèrent que les joints de lattes jouent un rôle important dans l'émission de dislocations à partir des interfaces. Or, comme on trouve beaucoup plus d'interfaces dans la martensite que dans la bainite, il est tout à fait envisageable que les mécanismes de sources soient influencés par la taille de la microstructure. Par conséquent, il semble logique de ré-identifier la loi  $K(T)$  sur la martensite, et il serait intéressant de comparer les résultats à ceux obtenus avec la bainite.

	$\tau_0$ (MPa)	$a^{ss}$	$a^{su}$	$\rho_0$ (m <sup>-2</sup> )	$K$	$g_c$ (nm)	$D_{grain}$ (μm)
<b>Initial</b>	88,9	0,251		1,0 10 <sup>14</sup>	25	8	2

	$\dot{\gamma}_0$ (s <sup>-1</sup> )	$\Delta G_0$ (eV)	$\tau_R$ (MPa)	$p$	$q$
<b>initial</b>	10 <sup>6</sup>	1,17	498	0,283	1,17

**Tableau IV.6 :** Jeu de paramètres initial à considérer lors d'une identification des paramètres pour la martensite, ou pour un autre acier de cuve (paramètres fixés en rouge)

## Conclusion du chapitre IV

### Formulation du modèle de comportement :

*Un modèle de plasticité cristalline a été proposé afin de décrire le comportement de l'acier de cuve 16MND5 dans le domaine de la transition ductile / fragile. Par rapport à la description du comportement 'athermique' dans le fer- $\alpha$  [HOC99] [SEK04], les modifications des équations du modèle ont porté sur plusieurs aspects :*

- *Loi d'écoulement : une loi d'écoulement activée thermiquement a été implémentée pour intégrer l'effet de la friction de réseau sur le glissement plastique [LOU78].*
- *Loi d'écrouissage : une loi d'écrouissage 'basse température' proposée par Rauch et al. [RAU93] a été discrétisée sur les 24 systèmes de glissement et implémentée. Cette loi décrit continûment la transition entre le comportement plastique 'basse' et 'haute' température. L'activation préférentielle des systèmes de glissement  $\{110\}\langle 111 \rangle$  par rapport aux systèmes  $\{112\}\langle 111 \rangle$  a été prise en compte ;*
- *Loi d'évolution de  $\rho^s$  : la loi d'évolution des densités de dislocations a été modifiée afin d'introduire une dépendance en température des mécanismes de production et d'annihilation des dislocations ;*

### Implémentation numérique :

*Le modèle a été implémenté dans un cadre en grandes transformations dans le code éléments finis ABAQUS. Nous avons appliqué un schéma d'intégration de type Forward Gradient aux équations du nouveau modèle.*

### Identification des paramètres du modèle de comportement :

*L'identification des paramètres du modèle a ensuite été réalisée par méthode inverse (logiciel SiDoLo) et en plusieurs étapes :*

- *Interface SiDoLo-ABAQUS : des simulations de traction simple sont réalisées à différentes températures avec le code EF ABAQUS sur une microstructure simplifiée (4096 éléments / 512 orientations représentatives). Le logiciel SiDoLo calcule l'écart entre les courbes de tractions expérimentales et simulées, puis itère sur les valeurs de paramètres à identifier jusqu'à minimiser l'écart.*
- *Choix des paramètres à identifier : on distingue les paramètres 'accessibles expérimentalement' des paramètres à identifier. Les paramètres accessibles expérimentalement ( $\Delta G_0$ ,  $\rho_0$ ,  $D_{latte}$ ) sont déterminés à partir des travaux du chapitre III. D'autres paramètres sont fixés d'après les données de la littérature ( $\dot{\gamma}_0$ ,  $g_c$  à 25°C et -196°C). La matrice d'interaction  $a^{su}$  est supposée isotrope. L'identification par méthode*



*inverse porte surtout sur les paramètres non accessibles expérimentalement et qui commandent l'écroutissage :  $\tau_0$ ,  $a^{su}$ ,  $K$  et  $g_c$ .*

- *Identification de  $K(T)$  et  $g_c(T)$  : pour obtenir un accord expérience / simulation satisfaisant, il est nécessaire d'introduire une dépendance en température des paramètres  $K$  et  $g_c$  de la loi d'évolution des densités de dislocations. Il s'agit de deux paramètres 'clé' non accessibles expérimentalement mais jouant un rôle primordial sur l'écroutissage du matériau. Nous mettons en évidence la nécessité tant théorique qu'expérimentale de considérer les paramètres  $K$  et  $g_c$  dépendants de  $T$  ;*
- *Procédure d'identification optimisée : une procédure simplifiée d'identification des paramètres du modèle a été proposée afin d'appliquer notre approche à d'autres aciers de cuve présentant une microstructure légèrement différente. Cette procédure pourra notamment être appliquée à l'identification des paramètres du modèle dans la martensite.*

## Références bibliographiques

[ARI99] ARIZMENDI (D.) – *Simulation par la méthode des éléments finis de la déformation plastique des cristaux à structure cubique centrée en utilisant un modèle basé sur les mécanismes physiques de la plasticité cristalline*. Thèse de Doctorat, Université Paris 13, 1999.

[BER04] BERBENNI (S.), FAVIER (V.), LEMOINE (X.), BERVEILLER (M.)- *A micromechanical approach to model the bake hardening effect for low carbon steels*. Scripta Materialia, vol. n°51, pp. 303-308, 2004.

[BÖH01] BÖHMERT (J.), MÜLLER (G.) – *Thermally activated deformation of irradiated reactor pressure vessel steel*. Journal of Nuclear Materials, vol n°301, pp. 227-232, 2001.

[CAI93] CAILLETAUD (G.), PILVIN (P.) – *Identification and inverse problems related to material behaviour*. Proceedings of the International Seminar on Inverse problems, Clamart, pp. 79-86, 1994.

[ERI03] ERIEAU (P.). - *Etude expérimentale et analyse numérique de l'influence des hétérogénéités induites par la déformation à froid sur la recristallisation primaire d'un acier IF-Ti*. Thèse de Doctorat, Ecole Centrale Paris, 2003.

[ERI04] ERIEAU (P.), REY (C.) – *Modelling of deformation and rotation bands and of deformation induced grain boundaries in IF steel aggregate during large plane strain compression*. International Journal of Plasticity, vol. n°20, pp. 1763-1788, 2004.

[ESS79] ESSMAN (U.) et MUGRHRABI (H.) – *Annihilation of dislocations during tensile and cyclic deformation and limits of dislocations densities*. Philosophical Magazine, vol. A40, n°6, pp. 731-756, 1979.

[EST84] ESTRIN (Y.), MECKING (H.) – *A unified phenomenological description of work hardening and creep based on one-parameter models*. Acta metallurgica, vol 32, N°1, pp. 57-70, 1984.

[FOR99] FOREST (S.) – *Lois de comportement inélastiques en transformations finies*. Rapport technique, Cours de DEA Mécanique & Matériaux, 1999.

[HER98] HERAUD (S.) – *Du polycristal au multicristal : élaboration d'un mésoscope numérique pour une analyse locale en élastoviscoplasticité*. Thèse de Doctorat, Commissariat à l'Energie Atomique, 1998.

[HOC99] HOC (T.). – *Etudes expérimentale et numérique de la localisation lors de changements de trajets dans un acier doux*. Thèse de Doctorat, Ecole Centrale Paris, 1999.

[HOC01] HOC (T.), REY (C.), RAPHANEL (J. L.) – *Experimental and numerical analysis of localization during sequential test for an IF-Ti steel*. Acta Materialia, vol. n°49, pp. 1835-1846, 2001.

- [KEH63] KEH (A.S.), WEISMANN (S.), in *Electron Microscopy and Strength of Crystals*, Thomas, G. and Washburn, J. (eds.), Interscience, New York, 231, 1963.
- [KRO63] KROUPA (F.) *Physica Status Solidi*, vol. n°3, K391, 1963.
- [KOC75] KOCKS (U. F.), ARGON (A.S) et ASHBY (M.F.) – *Thermodynamics and kinetics of slip*- Progress in Materials Science, vol 19. Pergamon Press Oxford, 1975.
- [LEE69] LEE (E. H.) – *Elastic-plastic deformation at finite strains* – Journal of Applied Mechanics, vol. n°36, pp. 1-6, 1969.
- [LOU78] LOUCHET (F.), KUBIN (L.P.), VESELY (D.) – *Description of low-temperature interstitial hardening of the b.c.c. lattice from in situ experiments*, Philosophical Magazine A, vol. n°38, pp. 205-221, 1978.
- [MEC81] MECKING (H.), KOCKS (U.F.) – *Kinetics of flow and strain hardening*. Acta metallurgica, vol. n°29, pp. 1865-1875, 1981.
- [NAK66] NAKADA (Y.), KEH (A.S.) – *Latent hardening in iron single crystals*. Acta Metallurgica, vol. n°14, Issue 8, pp. 961-973, 1966.
- [PEI83] PEIRCE (D.), ASARO (R.J.) et NEEDLEMAN (A.) – *Material rate dependence and localized deformation in crystalline solids*. Acta metallurgica, vol n°31, pp. 1951-1976, 1983.
- [PIL98] PILVIN (P.) – *SiDoLo version 2.4, Notice d'utilisation*. Rapport Technique, Ecole Centrale Paris, 1998.
- [RAU93] RAUCH (E.) – *Etude de l'écroutissage des métaux, aspects microstructuraux et lois de comportement*. Thèse de HDR, Institut National Polytechnique de Grenoble, 1993.
- [SEK04] SEKFALI (S.) – *Influence de la microstructure sur le comportement local dans les aciers 16MND5*. Thèse de Doctorat, Ecole Centrale Paris, 2004.
- [STA02] STAINIER (L.), CUITIÑO (A.M.) et ORTIZ (M.) – *A micromechanical model of hardening, rate sensitivity and thermal softening in bcc single crystals* – Journal of the Mechanics and Physics of Solids, vol. n°50, pp. 1511-1545, 2002.
- [TEO91] TEODOSIU (C.), RAPHANEL (J.L.), TABOUROT (L.) – *Finite element simulation of the large elastoplastic deformation of multicrystals*. MECAMAT'91, Teodosiu, Raphanel & Sidoroff (eds) © Balkema, Rotterdam ISBN 90 5410 317 5, pp. 153-160, 1993.
- [TAB92] TABOUROT (L.) – *Loi de comportement élastoviscoplastique du monocristal en grandes déformations*. Thèse de Doctorat, Institut National Polytechnique de Grenoble, 1992.
- [UEN03] UENISHI (A.) – *Comportement thermodynamique à grandes vitesses de déformation des aciers sans interstitiels à durcissement par solution solide*. Thèse de Doctorat, Université Paris 13, laboratoire LPMTM, 2003.

[UET03] UENISHI (A.), TEODOISU (C.) – *Solid solution softening at high strain rates in Si- and / or Mn-added interstitial free steels*- Acta materallia, vol. n°51, pp. 4437-4446, 2003.



## Chapitre V

# **Simulation numérique des hétérogénéités mécaniques dans la microstructure bainitique**

## TABLE DES MATIÈRES

### V. Simulation numérique des hétérogénéités mécaniques dans la microstructure bainitique

<b>Introduction .....</b>	<b>143</b>
<b>V.A Choix de l'agrégat polycristallin, génération du maillage et conditions aux limites 144</b>	
<i>V.A.1 Choix d'un agrégat polycristallin .....</i>	<i>144</i>
<i>V.A.2 Génération du maillage.....</i>	<i>146</i>
<i>V.A.3 Choix des conditions aux limites .....</i>	<i>147</i>
<b>V.B Etude numérique qualitative de le l'effet de <math>\langle \sigma_I \rangle</math>, <math>T</math> et <math>\chi</math> sur l'évolution des hétérogénéités locales .....</b>	<b>149</b>
<i>V.B.1 Etude des cartographies de champs locaux .....</i>	<i>149</i>
<i>V.B.2 Etude des distributions de contraintes principales .....</i>	<i>151</i>
<i>V.B.3 Etude des contraintes de clivage <math>\sigma_{\{100\}}</math> .....</i>	<i>154</i>
<b>V.C Quantification des hétérogénéités : identification de fonctions mathématiques de distribution de <math>\sigma_I</math> à partir des résultats de simulation numérique.....</b>	<b>158</b>
<i>V.C.1 Etude préliminaire.....</i>	<i>158</i>
<i>V.C.2 Utilisation de distributions de type 'valeurs extrêmes'.....</i>	<i>160</i>
<i>V.C.3 Définition et paramétrisation d'une fonction de distribution décrivant l'évolution des hétérogénéités de <math>\sigma_I</math> .....</i>	<i>164</i>
<b>Conclusion du chapitre V .....</b>	<b>168</b>
<b>Références bibliographiques .....</b>	<b>170</b>

## Introduction

### Objectifs :

Les modèles d'approche locale de la rupture, et notamment ceux dérivés du modèle de Beremin, sont largement utilisés dans la littérature. Dans le cadre de la prédiction de la ténacité des aciers faiblement alliés, ils demeurent aujourd'hui encore incontournables. Toutefois, dans ces modèles, la probabilité de rupture dépend uniquement de la plus grande contrainte principale 'positive'. Si l'effet de la déformation a été introduit de manière phénoménologique dans des modèles classiques d'approche locale, l'influence des hétérogénéités de contraintes n'est pas prise en compte à l'échelle du volume élémentaire.

L'étude des hétérogénéités de contraintes à cette échelle nécessite une modélisation fine du comportement plastique et de la microstructure. Notre démarche consiste à introduire directement l'effet de l'évolution des hétérogénéités mécaniques dans un modèle d'approche locale : on propose de faire appel à une fonction statistique qui décrit l'évolution des hétérogénéités de  $\sigma_I$ .

Cette description statistique des hétérogénéités de  $\sigma_I$  peut être couplée à une fonction de distribution des tailles de défauts critiques. Cette approche vise à formuler un modèle d'approche locale de la rupture qui tient compte de l'effet des distributions de  $\sigma_I$  à l'échelle du volume élémentaire.

### Description de la démarche :

Le **chapitre V** s'articule autour de trois grandes parties :

- Dans la partie **V.A**, nous mettons en place une modélisation micromécanique du comportement de l'acier de cuve. Nous utilisons les résultats de l'étude de la représentativité cristallographique de la microstructure du **chapitre III**. Par ailleurs, l'implémentation du modèle de comportement et l'identification des paramètres ont fait l'objet du **chapitre IV**.
- Le sous chapitre **V.B** présente les résultats de simulation d'agrégats polycristallins sont réalisées à triaxialité imposée sur deux microstructures bainitiques. On étudie l'effet de différents paramètres sur la distribution des contraintes principales  $\sigma_I$  : le niveau de triaxialité  $\chi$ , la contrainte principale maximale moyenne dans l'agrégat  $\langle \sigma_I \rangle$ , la contrainte et la déformation équivalentes moyennes  $\langle \sigma_{mises} \rangle$  et  $\langle \varepsilon_{eq} \rangle$ . Les distributions de  $\sigma_I$  sont également comparées aux distributions de contraintes normales au plans de clivage  $\sigma_{\{100\}}$ .
- Dans la partie **V.C**, nous montrons que des fonctions de distribution de type valeurs extrêmes' décrivent de façon satisfaisante l'évolution des hétérogénéités de  $\sigma_I$ . Une étude paramétrique est réalisée afin de proposer une formulation générale de la distribution des valeurs extrêmes de  $\sigma_I$  en fonction de  $\langle \sigma_I \rangle$ ,  $\langle \sigma_{mises} \rangle$  et  $T$ .



## V.A Choix de l'agrégat polycristallin, génération du maillage et conditions aux limites

Dans cette première partie, nous discutons des choix adoptés en ce qui concerne la description de la microstructure, la génération du maillage par éléments finis, ainsi que les conditions aux limites appliquées.

### V.A.1 Choix d'un agrégat polycristallin

Le choix de l'agrégat va résulter d'un compromis entre deux critères : la notion de représentativité de l'agrégat vis-à-vis du comportement local d'une part, et la nécessité de limiter la taille et la durée des simulations numériques d'autre part.

La question de la taille d'agrégat cristallographiquement représentative a déjà été traitée dans le chapitre III (*'Détermination d'une taille de microstructure cristallographiquement représentative'*). Deux indicateurs cristallographiques sont utilisés : l'indice de texture  $J$  d'une part, et l'indice de MacKenzie  $M$ , qui est calculé à partir de la fonction de distribution des désorientations cristallographiques.

Plusieurs zones EBSD de différentes tailles ont été analysées, afin d'estimer la dispersion des valeurs de  $M$  et  $J$  en fonction de la taille de zone EBSD. On montre que pour un pas d'analyse EBSD de  $1\ \mu\text{m}$ , une zone de  $300 \times 300\ \mu\text{m}^2$  conduit à des dispersions acceptables des valeurs de  $M$  et  $J$ . (cf. figure III.4 dans le **chapitre III**).

Toutefois, il faut que la taille d'agrégat soit compatible avec la nécessité de réaliser un grand nombre de simulations. En premier lieu, nous souhaitons étudier l'effet de plusieurs paramètres sur les hétérogénéités, ce qui nécessite la réalisation de plusieurs simulations et au moins sur deux tirages cristallographiques d'agrégats.

Or, notre approche de simulation numérique n'est pas compatible avec l'utilisation d'agrégats de  $250 \times 250$  voire  $300 \times 300\ \mu\text{m}^2$ . A titre d'exemple, un agrégat de  $300 \times 300\ \mu\text{m}^2$  constitué de 3 couches d'éléments C3D8R de  $1\ \mu\text{m}$  de côté va comporter approximativement 300000 éléments : avec le code éléments finis ABAQUS, le temps de calcul jusqu'à une déformation équivalente moyenne  $\langle \varepsilon_{eq} \rangle$  de 10% serait alors de l'ordre de 10 jours. Compte tenu du grand nombre de variables d'état à sauvegarder, nous sommes également limités par l'interface de visualisation et de dépouillement ABAQUS CAE, qui supporterait difficilement de telles tailles de calculs.

C'est ainsi que nous avons réalisé deux microstructures d'agrégats numériques à partir d'analyses EBSD de  $210 \times 201\ \mu\text{m}^2$  et avec un pas d'analyse de  $1\ \mu\text{m}$ . L'agrégat est constitué de 3 couches identiques reproduisant la cartographie EBSD, ce qui correspond à 126000 éléments 3D à interpolation linéaire et intégration réduite (C3D8R) : le temps de calcul jusqu'à une déformation équivalente moyenne  $\langle \varepsilon_{eq} \rangle$  de 10% est d'environ 4 jours.

Les deux microstructures correspondent à deux cartographies EBSD réalisées dans des zones disjointes (figure V.1). Les textures  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle 110 \rangle$  des deux agrégats sont présentées sur les figures V.2 et V.3.

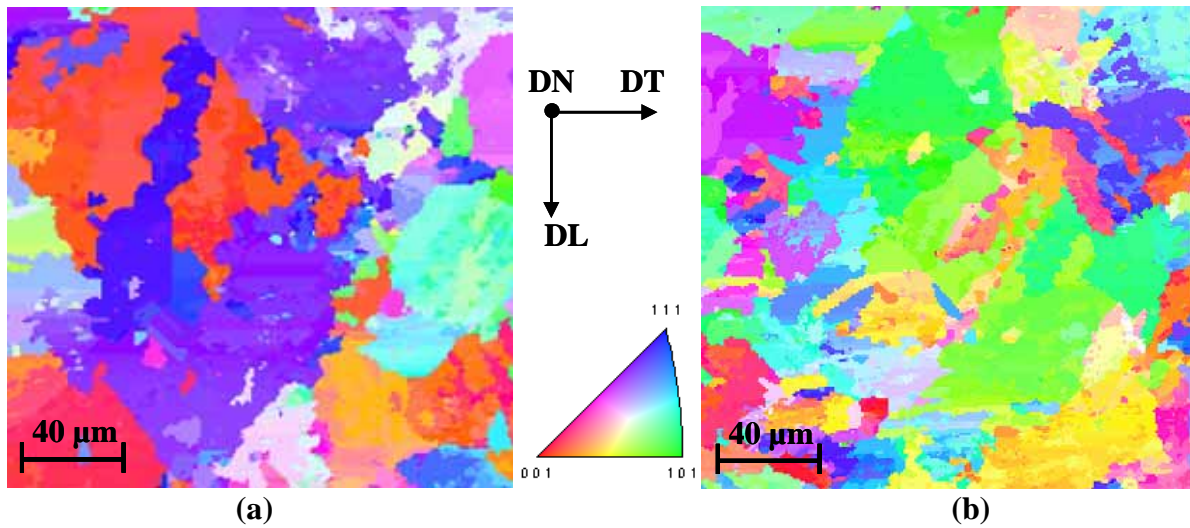


Fig. V.1 : Cartographies EBSD des deux zones n°1 (a) et n°2 (b) utilisées par la suite dans le cadre de la simulation numérique

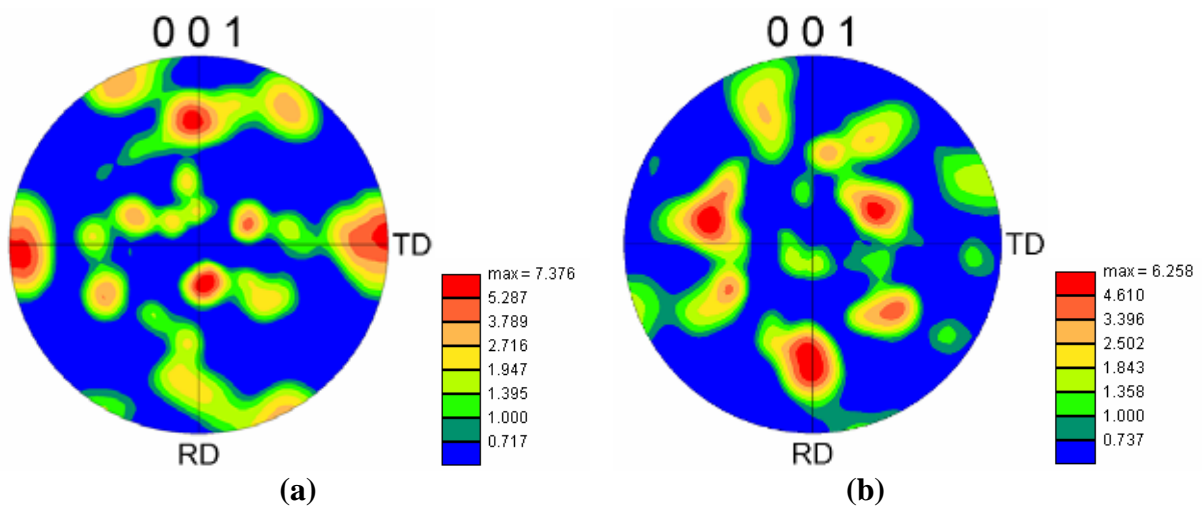


Fig. V.2 : Texture <100> correspondant aux zones EBSD n°1 (a) et n°2 (b)

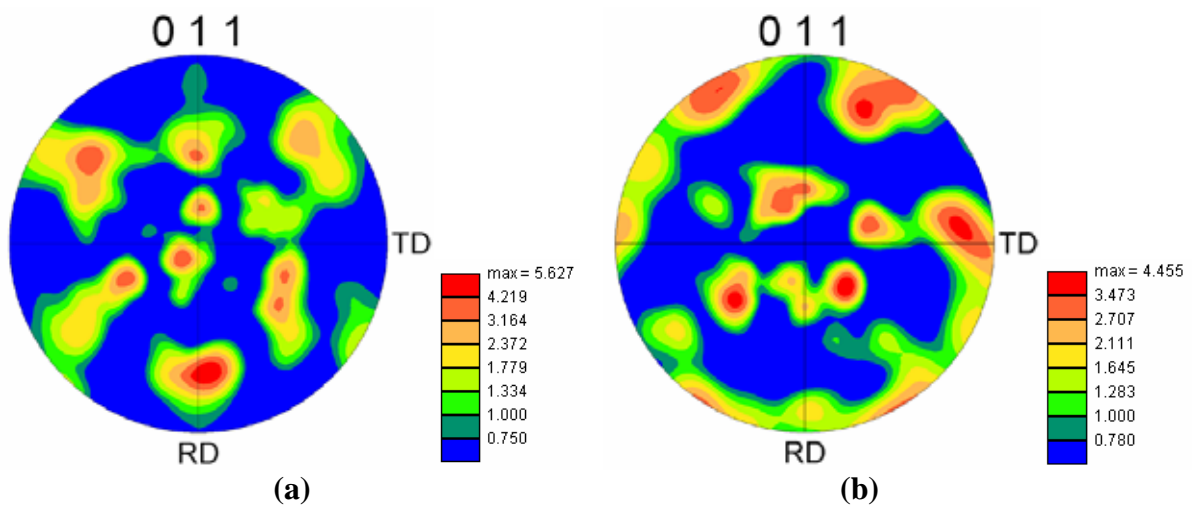


Fig. V.3 : Texture <110> correspondant aux zones EBSD n°1 (a) et n°2 (b)

La comparaison des résultats obtenus sur ces deux réalisations microstructurales doit permettre de juger de leur représentativité vis-à-vis des distributions de contraintes principales. Bien qu'une zone de  $200 \times 200 \mu\text{m}^2$  ne soit pas rigoureusement représentative par rapport aux indices de texture et de MacKenzie, nous verrons par la suite qu'il en va autrement des distributions de contraintes locales.

Ce choix de modélisation ne permet pas de rendre compte de l'effet des couches sous-jacentes sur les distributions de champs locaux. Toutefois, dans ses travaux de thèse, Sekfali [SEK04] a comparé les distributions de déformations obtenues expérimentalement par micro-extensométrie aux distributions de déformations simulées numériquement sur un agrégat constitué d'une seule couche d'éléments. Les distributions ont une allure très comparable, mais les maxima de déformation ne sont pas localisés aux mêmes endroits. Les résultats suggèrent que l'effet des couches sous-jacentes affecte les distributions spatiales plutôt que les distributions de valeurs dans l'agrégat. Il n'a cependant pas été possible de valider cette hypothèse en ce qui concerne les champs de contrainte.

### V.A.2 Génération du maillage

Une fois les acquisitions EBSD réalisées, la première étape consiste à traiter les données à l'aide du logiciel OIM Analysis, afin de retirer les points mal indexés (indice de qualité inférieur à une valeur limite). Il faut ensuite récupérer, dans la base de données de l'acquisition, toutes les informations nécessaires à la simulation par éléments finis : les coordonnées des points de l'acquisition ainsi que les angles de Bunge-Euler  $(\phi_1, \phi, \phi_2)$ , qui décrivent l'orientation du réseau cristallin par rapport au repère macroscopique.

Le maillage est généré en adoptant la démarche suivante :

- Les éléments sont de type C3D8R : briques cubiques à interpolation linéaire et intégration réduite.
- On associe un point de l'acquisition EBSD à chacun d'entre eux. A chaque élément de l'agrégat est associé un triplet d'angles  $(\phi_1, \phi, \phi_2)$ , c'est à dire une orientation cristalline. Le pas de l'acquisition détermine la dimension de l'élément et fixe ainsi la finesse du maillage.
- A partir d'une acquisition EBSD initialement en 2D, trois couches identiques d'éléments C3D8R sont superposées pour constituer un agrégat 3D.
- La loi de comportement est introduite dans le code à l'aide d'une fonctionnalité d'ABAQUS (*subroutine* UMAT) permettant de programmer le modèle micromécanique décrit dans le chapitre précédent. A chaque incrément de temps, la *subroutine* UMAT calcule l'incrément de contrainte  $\Delta\sigma$  et la matrice tangente  $\Delta\sigma / \Delta\varepsilon$ .

On attribue à chaque élément :

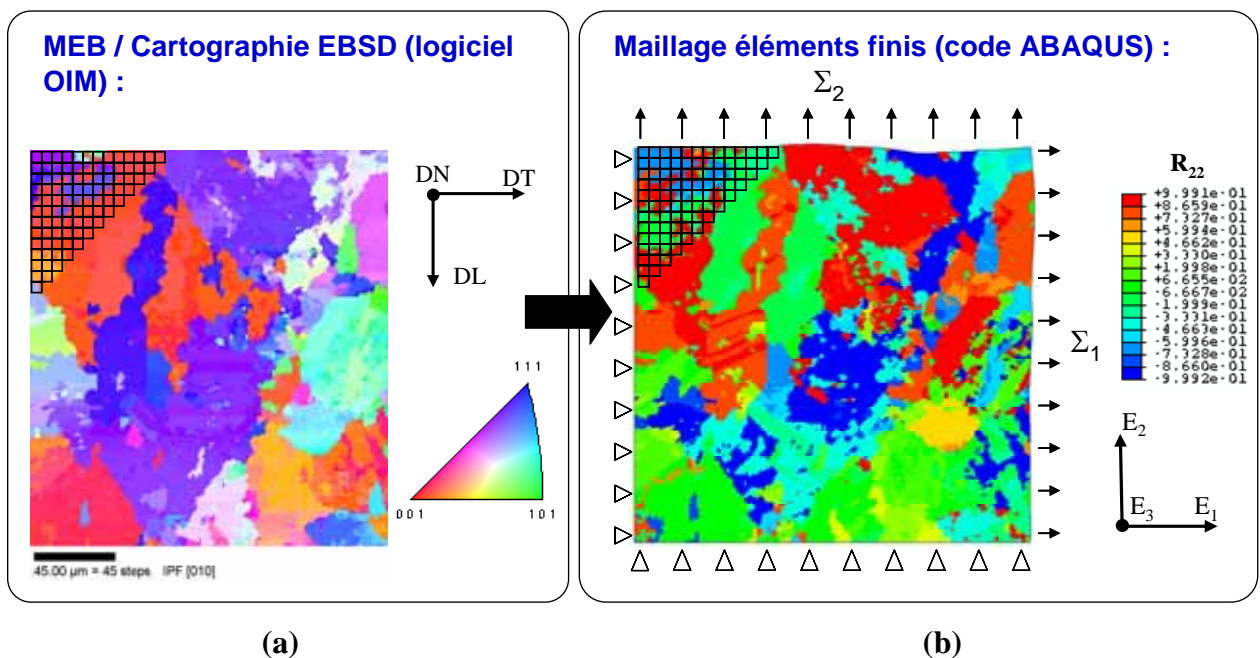
- un triplet d'angles d'Euler, c'est-à-dire une orientation cristallographique ;
- une évolution locale spécifique des glissements plastiques  $\gamma^s$  ;
- une évolution locale spécifique des densités de dislocations  $\rho$ .

On note que le volume de l'agrégat vaut environ à  $(50 \mu\text{m})^3$ , ce qui correspond approximativement au volume d'un maillon élémentaire de l'approche locale de la rupture.

### V.A.3 Choix des conditions aux limites

#### a) Pilotage de la simulation à triaxialité moyenne imposée

Afin de reproduire les niveaux de triaxialité rencontrés dans une éprouvette CT en fond de fissure, nous nous plaçons dans des conditions de déformations planes et nous imposons un facteur proportionnel  $k$  liant les contraintes  $\Sigma_1$  et  $\Sigma_2$  sur les bords de l'agrégat (figure V.4).



**Fig. V.4 :** Principe de la construction du maillage éléments finis : figure de pôles inverse  $\langle 010 \rangle$  (a) et cartographie de la composante  $R_{22}$  de la matrice de passage du repère macroscopique vers le repère cristallographique (b)

Les déplacements des deux faces inférieure et supérieure de l'agrégat sont nuls, si bien que la déformation moyenne  $\langle \varepsilon_{33} \rangle$  est nulle (conditions aux limites de type déformations planes) :

$$\langle \sigma_{22} \rangle = \frac{1}{k} \langle \sigma_{11} \rangle \quad (k > 1) \quad (\text{V.1})$$

Si on suppose que le comportement plastique du matériau obéit au critère de normalité de l'écoulement à la surface de charge, la condition de déformation plane implique que la composante moyenne  $\langle s_{33} \rangle$  du tenseur déviateur des contraintes soit nulle en plasticité :

$$\langle s_{33} \rangle = \langle \sigma_{33} \rangle - \frac{1}{3} \text{tr}(\underline{\underline{\sigma}}) = 0 \quad (\text{V.2})$$

Cette condition peut être considérée comme vérifiée dès lors que la déformation élastique est négligeable devant la déformation plastique. On obtient alors la relation :

$$\langle \sigma_{33} \rangle = \frac{1}{2} [\langle \sigma_{11} \rangle + \langle \sigma_{22} \rangle] \quad (\text{V.3})$$

La contrainte moyenne  $\langle \sigma_{33} \rangle$  s'écrit alors sous la forme :

$$\langle \sigma_{33} \rangle = \frac{(k+1)}{2} \langle \sigma_{22} \rangle \quad (\text{V.4})$$

Les composantes de cisaillement étant nulles en moyenne, il est possible de calculer la pression hydrostatique moyenne  $\langle p \rangle$  ainsi que la contrainte équivalente moyenne  $\langle \sigma_{mises} \rangle$  :

$$\langle p \rangle = \frac{1}{3} \sum_{k=1}^3 \langle \sigma_{kk} \rangle = \frac{k+1}{2} \langle \sigma_{22} \rangle \quad (\text{V.5})$$

$$\langle \sigma_{mises} \rangle = \sqrt{\frac{1}{2} [(\langle \sigma_{11} \rangle - \langle \sigma_{22} \rangle)^2 + (\langle \sigma_{11} \rangle - \langle \sigma_{33} \rangle)^2 + (\langle \sigma_{22} \rangle - \langle \sigma_{33} \rangle)^2]} \quad (\text{V.6})$$

$$\langle \sigma_{mises} \rangle = \frac{\sqrt{3}(k-1)}{2} \langle \sigma_{22} \rangle \quad (\text{V.7})$$

Le taux de triaxialité macroscopique  $\langle \chi \rangle$  est défini par la relation :

$$\langle \chi \rangle = \frac{\langle p \rangle}{\langle \sigma_{mises} \rangle} \quad (\text{V.8})$$

En utilisant les relations (V.5) et (V.7),  $\chi$  peut être exprimé en fonction du paramètre  $k$  :

$$\langle \chi \rangle = \frac{\sqrt{3}k+1}{\sqrt{3}k-1} \quad (\text{V.9})$$

Il est ainsi possible d'imposer le taux de triaxialité macroscopique lors du chargement, en jouant simplement sur le facteur  $k$  :

$$k = \frac{\chi\sqrt{3}+1}{\chi\sqrt{3}-1} \quad (\text{V.10})$$

Deux niveaux de triaxialité sont ainsi simulés  $\chi = 1,5$  ou  $2,5$  en imposant respectivement  $k = 2,25$  et  $1,6$ .

**b) Etude de l'effet des paramètres  $\chi$ ,  $T$  et  $\langle\sigma_I\rangle$**

Pour chaque état de triaxialité, quatre simulations sont réalisées à  $-60^\circ\text{C}$ ,  $-90^\circ\text{C}$ ,  $-150^\circ\text{C}$  et  $-196^\circ\text{C}$ . Les contraintes sont imposées de sorte à avoir une vitesse de déformation moyenne de l'ordre de  $\dot{\varepsilon} = 5 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ . Enfin, des sauvegardes sont réalisées tous les 250 MPa de manière à exploiter plusieurs étapes d'une même simulation.

Il est ainsi possible d'étudier l'évolution des champs locaux et en particulier des hétérogénéités de contrainte principale maximale  $\sigma_I$  en fonction de plusieurs paramètres :

- la triaxialité :  $\chi = 1,5$  et  $2,5$  ;
- la température :  $T = -60^\circ\text{C}$ ,  $-90^\circ\text{C}$ ,  $-150^\circ\text{C}$  et  $-196^\circ\text{C}$  ;
- la contrainte principale moyenne  $\langle\sigma_I\rangle$  ;
- la déformation moyenne équivalente au sens de Von Mises  $\langle\varepsilon_{eq}\rangle$ .

**V.B Etude numérique qualitative de le l'effet de  $\langle\sigma_I\rangle$ ,  $T$  et  $\chi$  sur l'évolution des hétérogénéités locales**

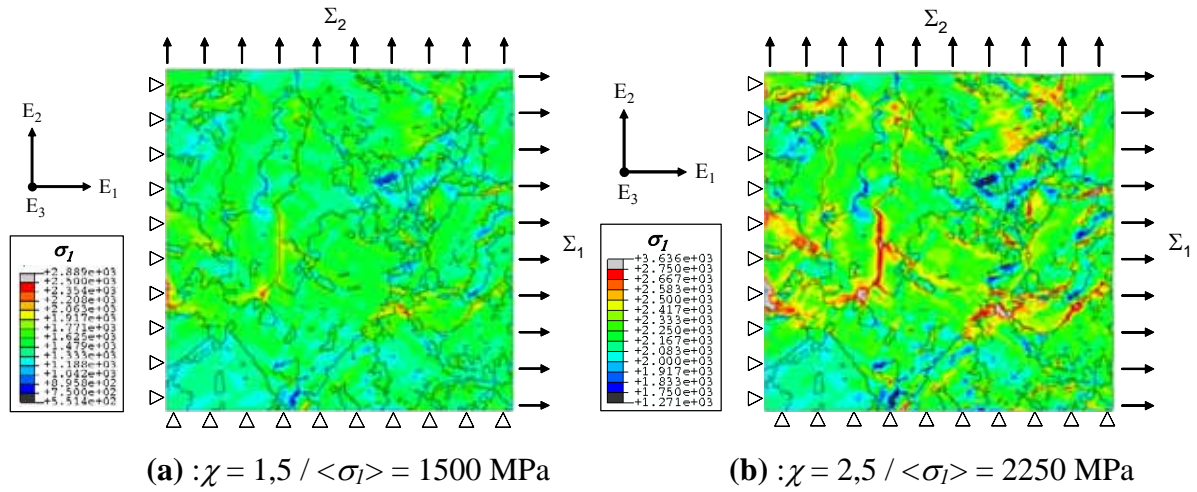
**V.B.1 Etude des cartographies de champs locaux**

L'ensemble des cartographies de contraintes principales sont détaillées dans l'**annexe E.1.a**. La figure V.5 montre les cartographies de contrainte principale  $\sigma_I$  sont données à  $T = -150^\circ\text{C}$  et  $\chi = 1,5$  dans l'agrégat n°1. Les contraintes principales maximales  $\sigma_I$  sont localisées à l'interface entre paquets de lattes ou alors à l'intérieur des paquets de lattes de plus petite taille.

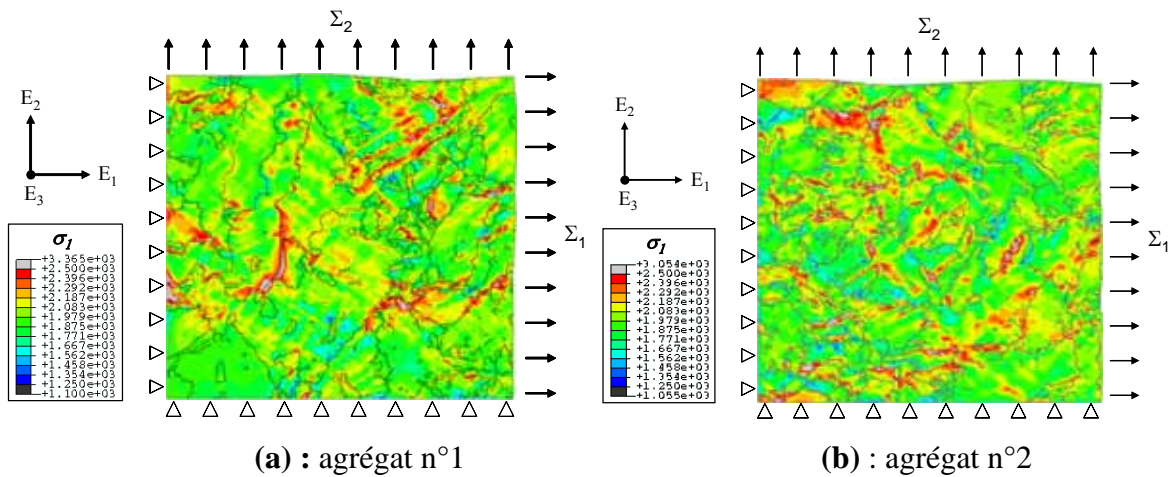
Les lieux de localisation des contraintes sont assez peu sensibles à la température ou à la triaxialité, mais on constate tout de même quelques différences quand à l'intensité relative des différentes zones de localisation. De plus, il faut souligner que les simulations ont été pilotées en contrainte principale moyenne et qu'elles conduisent à des niveaux de  $\langle\varepsilon_{eq}\rangle$  différents en fonction de la température et de la triaxialité.

La figure V.6 montre une comparaison des cartographies de  $\sigma_I$  entre les deux microstructures étudiées, et ce pour  $T = -90^\circ\text{C}$  et  $\chi = 1,5$ . Il apparaît que les contraintes principales se concentrent toujours à proximité de certains joints entre paquets de lattes, mais dans des lieux très différents.

Ces résultats suggèrent que la morphologie et les orientations cristallines influent grandement sur les lieux de concentrations de  $\sigma_I$ . Toutefois, les valeurs maximales atteintes localement dans les deux agrégats sont de l'ordre de 2500 à 3000 MPa : d'après les cartographies, la morphologie ne semble pas avoir une influence significative sur les hétérogénéités de  $\sigma_I$ . Toutefois, seule l'étude des distributions de valeurs de  $\sigma_I$  dans les deux agrégats peuvent apporter une réponse claire à cette question.



**Fig. V.5** : Cartographie  $\sigma_I$  à  $T = -150^\circ\text{C}$  :  $\chi = 1,5$  (a) et  $\chi = 2,5$  (b) (agrégat n°1)

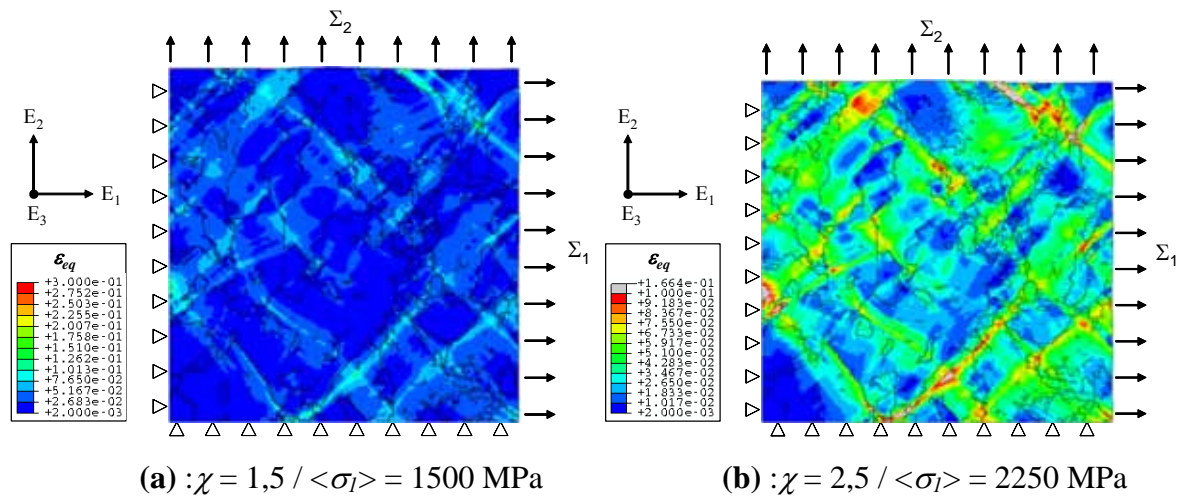


**Fig. V.6** : Cartographie  $\sigma_I$  à  $T = -90^\circ\text{C} / \chi = 2,5$  : agrégat n°1 (a) et n°2 (b)

Au cours du calcul d'agrégat, nous avons également accès à la déformation équivalente, qui est calculée par la relation suivante :

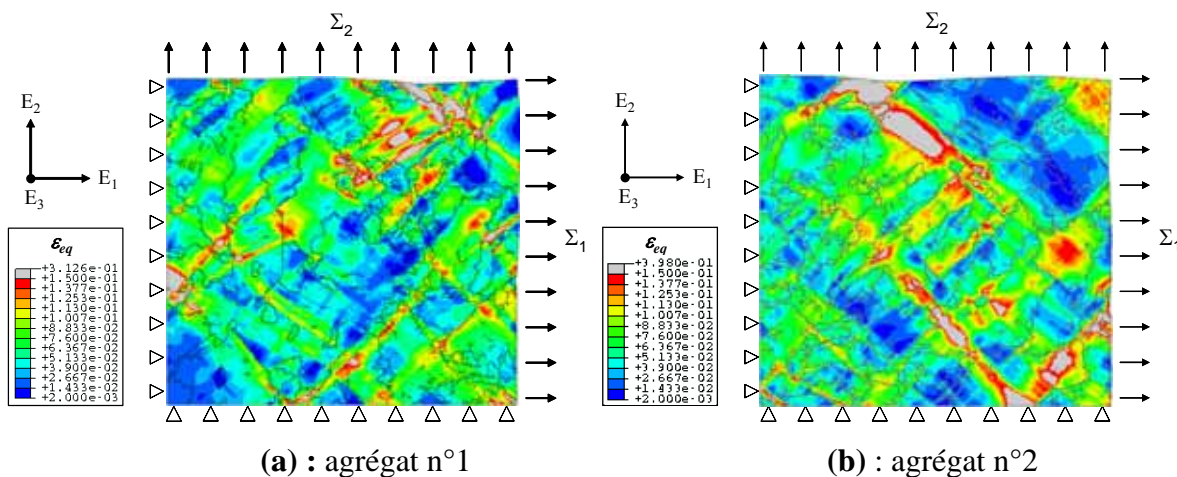
$$\varepsilon_{eq} = \sqrt{\frac{2}{3} \varepsilon : \varepsilon} \quad (\text{V.11})$$

Ces cartographies de déformation montrent une localisation en bandes (figure V.7) qui traversent les interfaces entre les paquets de lattes, ce qui a déjà été établi expérimentalement par Sekfali [SEK04]. Les cartographies de  $\langle \varepsilon_{eq} \rangle$  sont données dans l'annexe E.1.b pour chacune des valeurs de  $T$  et  $\chi$  et pour les agrégats n°1 et n°2.



**Fig. V.7 :** Cartographies  $\langle \varepsilon_{eq} \rangle$  à  $T = -150^\circ\text{C}$  :  $\chi = 1,5$  (a) et  $\chi = 2,5$  (b).

L'intensité des bandes de déformation dépend des valeurs de  $T$ ,  $\chi$  ou  $\langle \sigma_I \rangle$  imposées. Toutefois, la comparaison des cartographies entre les agrégats n°1 et n°2 suggère que le lieu de localisation des bandes est surtout lié à la microstructure et à la morphologie des paquets de lattes (cf. figure V.8 et annexe E.1.b).



**Fig. V.8 :** Cartographies  $\langle \varepsilon_{eq} \rangle$  à  $T = -90^\circ\text{C}$  /  $\chi = 2,5$  : agrégat n°1 (a) et n°2 (b)

Pour évaluer précisément le rôle de chaque paramètre ( $T$ ,  $\chi$ ,  $\langle \sigma_I \rangle$ , microstructure), il est nécessaire d'étudier les distributions de  $\sigma_I$ , et de mettre en place un critère de quantification des hétérogénéités.

### V.B.2 Etude des distributions de contraintes principales

Les histogrammes de distributions de valeurs de  $\sigma_I$  dans l'agrégat (cf. annexe E.2.a) fournissent des informations plus précises que les cartographies quant à l'évolution quantitative du niveau d'hétérogénéité. Dans un premier temps, la comparaison a porté directement sur la largeur des fonctions de distribution de  $\sigma_I$ . Les résultats obtenus avec



l'agrégat n°1 sont présentés sur les figures V.9, V.10 et V.11. La figure V.12 montre une comparaison des distributions de  $\sigma_I$  entre les agrégats n°1 et n°2.

La figure V.9 montre que les distributions de  $\sigma_I$  sont d'autant plus hétérogènes que la contrainte principale moyenne  $\langle \sigma_I \rangle$  est élevée. Pour expliquer cette relation, on peut invoquer une corrélation entre l'augmentation de la déformation et l'accroissement des hétérogénéités de  $\sigma_I$ . La corrélation entre l'augmentation de la déformation moyenne et l'accroissement des hétérogénéités de déformations a déjà été établie expérimentalement [LIN97].

Si, pour un niveau de triaxialité fixé, on étudie l'évolution des distributions de  $\sigma_I$  en fonction de  $T$ , il apparaît que celles-ci sont décalées vers les contraintes élevées quand  $T$  diminue. Ce décalage s'explique aisément par une augmentation de la limite d'élasticité lorsque  $T$  diminue. Mais en l'absence de comparaison à déformation moyenne fixée, il est impossible de conclure quant à l'effet de  $T$  sur les hétérogénéités. A triaxialité imposée, l'allure des distributions est également affectée par la température.

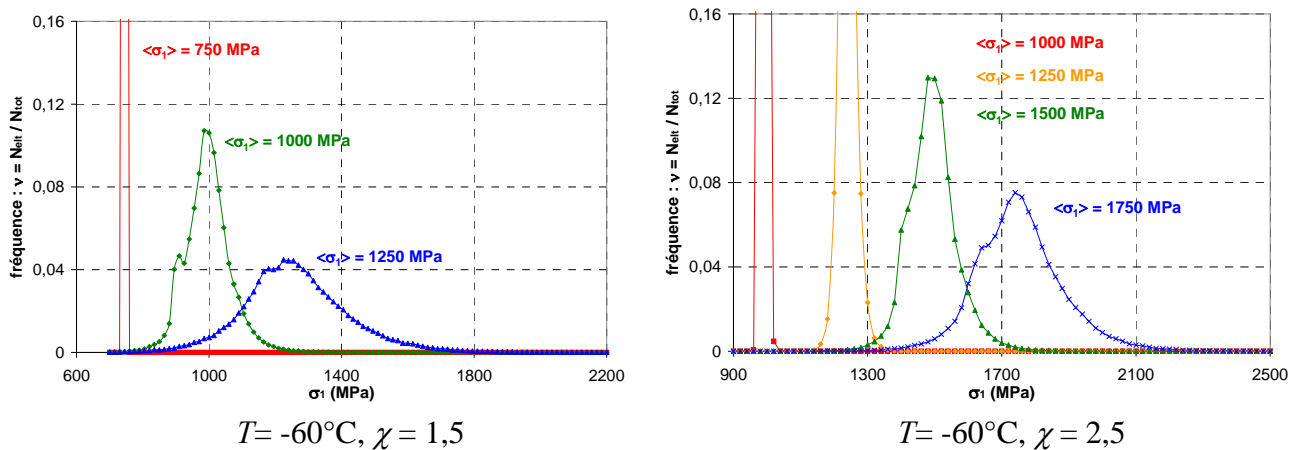


Fig. V.9 : Evolution des distributions de  $\sigma_I$  en fonction de  $\langle \sigma_I \rangle$  (agrégat n°1 /  $T = -60^\circ\text{C}$ )

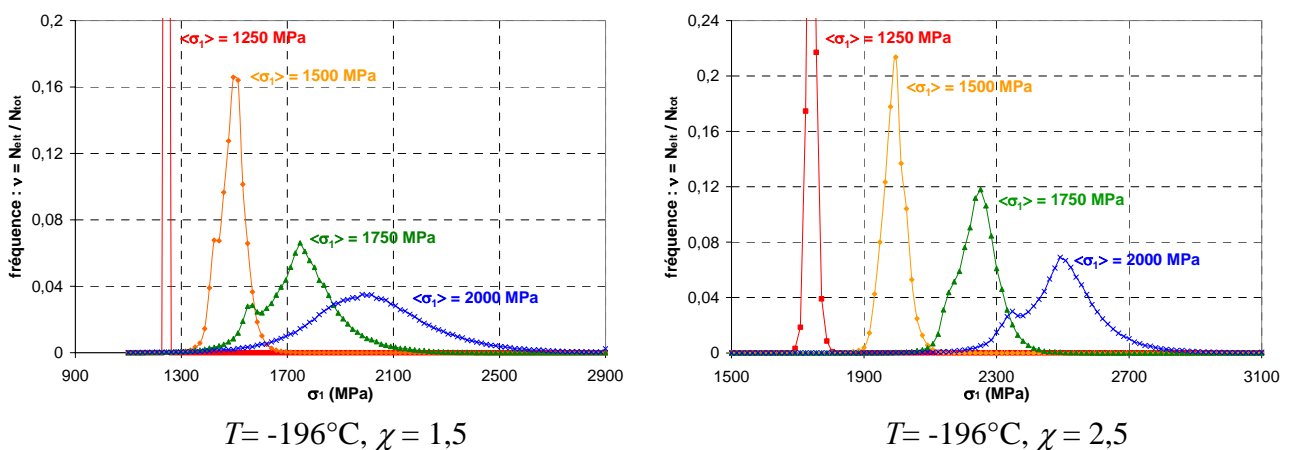
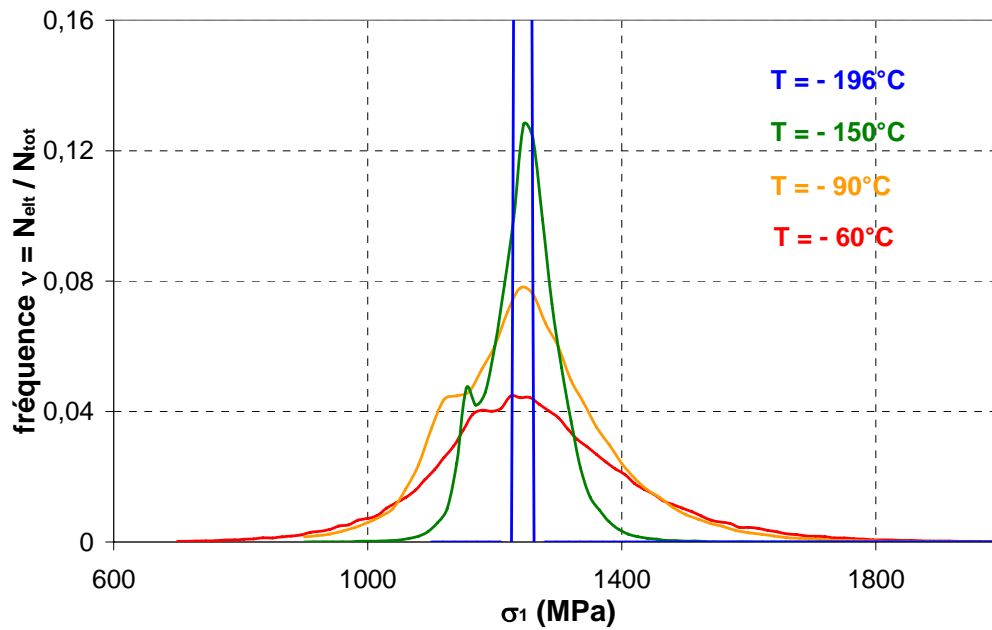


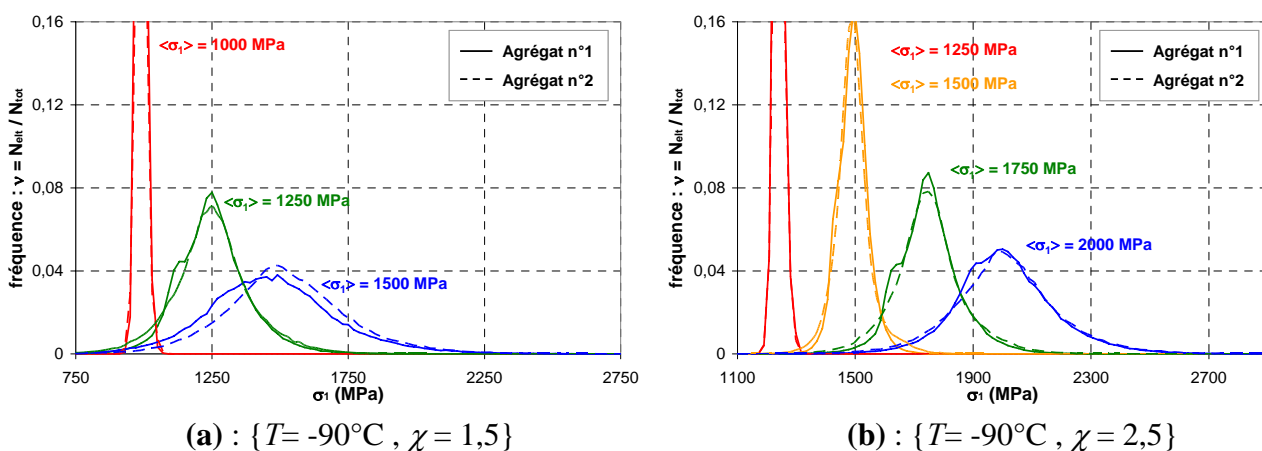
Fig. V.10 : Evolution des hétérogénéités de  $\sigma_I$  en fonction de  $\langle \sigma_I \rangle$  (agrégat n°1 /  $T = -196^\circ\text{C}$ )



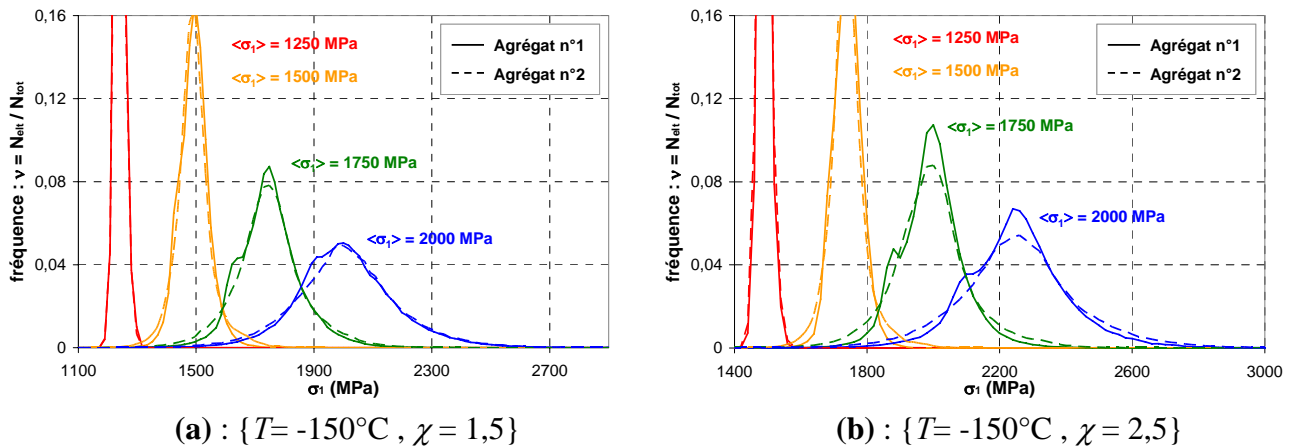
**Fig. V.11 :** Evolution des distributions de  $\sigma_1$  en fonction de  $T$  (agrégat n°1 /  $\langle \sigma_1 \rangle = 1250$  MPa /  $\chi = 1,5$ )

La comparaison de deux niveaux de triaxialité à contrainte moyenne et température fixées montre que les hétérogénéités de  $\sigma_1$  diminuent lorsque  $\chi$  augmente. Cette observation semble à priori surprenante : elle peut cependant trouver une explication dans le fait que, à  $\langle \sigma_1 \rangle$  fixée, la déformation équivalente moyenne est corrélée avec la triaxialité.

La comparaison des résultats de simulation numérique entre les deux agrégats bainitiques, permet d'étudier l'effet de la microstructure sur les distributions de contraintes principales : les figures V.12 et V.13 présentent une comparaison des distributions de  $\sigma_1$  entre les deux agrégats à  $T = -90^\circ\text{C}$  et  $-150^\circ\text{C}$ , ainsi que  $\chi = 1,5$  et  $2,5$ . Les queues de distributions de contrainte principale présentant un aspect très similaire entre les agrégats n°1 et n°2, sauf pour le cas de figure  $\{T = -90^\circ\text{C}, \chi = 1,5\}$ .



**Fig. V.12 :** Comparaison des distributions de  $\sigma_1$  entre les agrégats n°1 et n°2 pour  $T = -90^\circ\text{C}$  et  $\chi = 1,5$  (a) ou  $2,5$  (b)



**Fig. V.13** : Comparaison des distributions de  $\sigma_I$  entre les agrégats n°1 et n°2 pour  $T = -150^\circ\text{C}$  et  $\chi = 1,5$  (a) ou  $2,5$  (b)

En définitive, nous avons montré que la taille d'agrégat de  $200\mu\text{m} \times 200\mu\text{m} \times 3\mu\text{m} \approx (50\mu\text{m})^3$  n'est pas rigoureusement représentative cristallographiquement. Cependant, les simulations réalisées avec deux microstructures ne montrent pas de différence significative entre les distributions de  $\sigma_I$ . Cela suggère que dans l'approche locale de la rupture, le volume du maillon est assez représentatif des hétérogénéités de contraintes locales.

Deux arguments tendent toutefois à nuancer cette affirmation :

- Les simulations sont réalisées en imposant des conditions aux limites de déformation plane sur 3 couches d'éléments. Il serait intéressant de comparer ces distributions de contraintes principales à celles obtenues dans un agrégat 3D massif de taille  $50 \times 50 \times 50 \mu\text{m}$  [MAT06]. Toutefois, cette étude nécessiterait de réaliser des analyses EBSD tridimensionnelles du matériau, et ce afin de disposer d'une description satisfaisante de la microstructure bainitique dans l'épaisseur.
- L'étude porte sur les distributions de contraintes principales, alors que ce sont les contraintes normales aux plans de clivage (ainsi que la déformation locale) qui pilotent localement la rupture fragile. Or, l'approche micromécanique permet d'accéder aux contraintes locales de clivage  $\sigma_{\{100\}}$  dans l'agrégat. Pour cette raison, nous avons étudié les distributions de  $\sigma_{\{100\}}$ , afin de juger de la pertinence d'un critère de rupture fragile basé sur les hétérogénéités de  $\sigma_{\{100\}}$ .

### V.B.3 Etude des contraintes de clivage $\sigma_{\{100\}}$

D'un point de vue microscopique, l'étude des hétérogénéités de contraintes principales n'a pas de signification évidente : l'amorçage du clivage est en effet tributaire de l'orientation locale des plans de clivage par rapport aux directions principales. L'étude des contraintes normales aux plans de clivage  $\{100\}$  est susceptible d'apporter des informations plus locales.

**a) Calcul des contraintes de clivage :**

Par la suite, nous considérons les 3 plans de clivage {100}, {010} et {001}. Dans un premier temps, on exprime les vecteurs normaux unitaires  $\vec{n}$  à ces trois plans dans le repère macroscopique lié à l'échantillon :

$$\vec{n}^{macro} = \underline{\underline{R}} \cdot \vec{n}^{micro} \quad (V.12)$$

$\underline{\underline{R}}$  désigne la matrice de passage du repère macroscopique vers le repère microscopique. Dans le repère macroscopique, la contrainte normale au point M à l'un des 3 plans de clivage  $\sigma_n$  s'exprime :

$$\sigma_n = \vec{n}^{macro} \cdot \underline{\underline{\sigma}}(M) \cdot \vec{n}^{macro} \quad (V.13)$$

La plus grande contrainte normale aux trois plans de clivage est donnée par la relation suivante :

$$\sigma_{\{100\}} = \text{Max}(\sigma_{(100)}, \sigma_{(010)}, \sigma_{(001)}, 0) \quad (V.14)$$

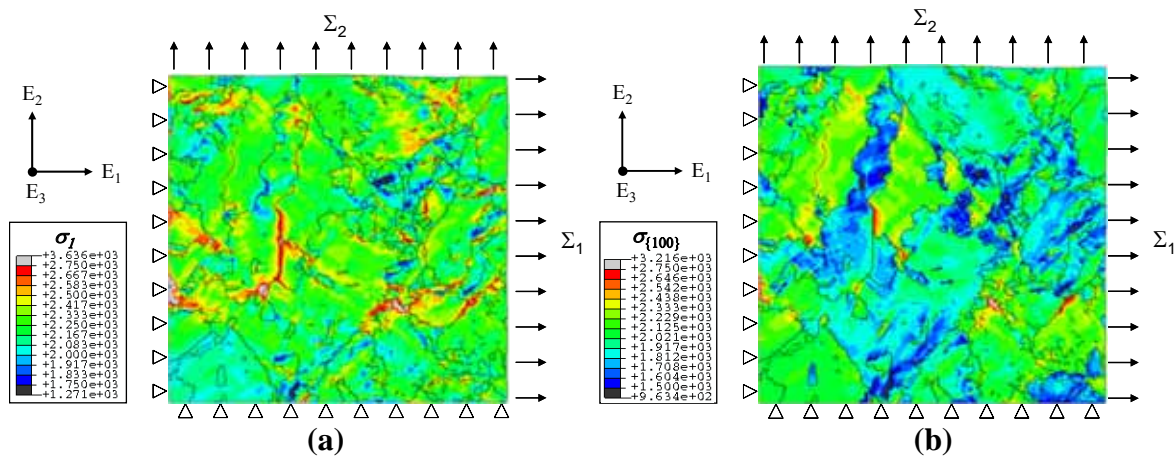
Seule la plus grande contrainte principale positive est prise en compte. Dans le code de calcul ABAQUS, la contrainte de clivage  $\sigma_{\{100\}}$  est sauvée en tant que variable interne en chaque point d'intégration du maillage, ce qui permet d'obtenir des cartographies et des histogrammes de distribution de  $\sigma_{\{100\}}$ .

**b) Etude des cartographies de  $\sigma_{\{100\}}$  :**

Dans un premier temps, nous nous sommes intéressés à la comparaison des cartographies de contraintes  $\sigma_{\{100\}}$  et  $\sigma_I$ . L'ensemble des cartographies de  $\sigma_{\{100\}}$  sont données pour les agrégats n°1 et n°2 dans l'**annexe E.2.b** (plusieurs valeurs de  $T$  et  $\chi$  sont traitées).

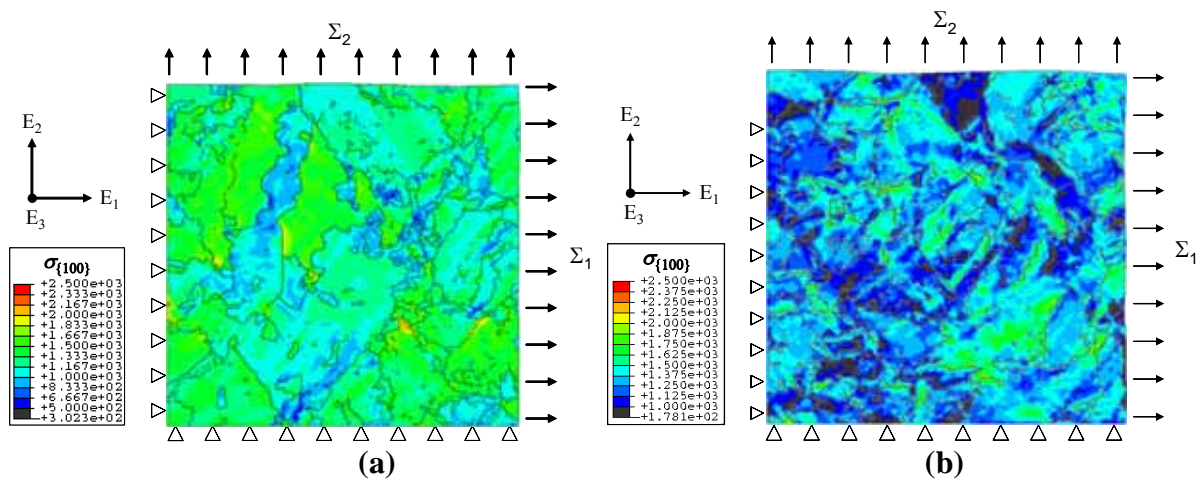
D'une part, la figure V.14 montre que les maxima de  $\sigma_{\{100\}}$  sont concentrés à certains joints entre les paquets de lattes. Toutes ces concentrations de  $\sigma_{\{100\}}$  correspondent bien à des concentrations de  $\sigma_I$ . Cependant, un certain nombre de sites de concentration de  $\sigma_I$  ne voient pas une concentration significative de  $\sigma_{\{100\}}$ . En somme, les cartographies de  $\sigma_I$  donnant les sites potentiels de concentration de  $\sigma_{\{100\}}$ .

D'autre part, on constate une hétérogénéité des valeurs moyennes de  $\sigma_{\{100\}}$  entre les différents paquets de lattes. Cet effet résulte de l'orientation plus ou moins favorable des plans {100} vis-à-vis du clivage dans les différents grains. Il n'apparaît évidemment pas sur les cartographies de  $\sigma_I$ . Enfin, on remarque que les valeurs de  $\sigma_{\{100\}}$  sont généralement beaucoup plus faibles que celles de  $\sigma_I$ , sauf dans les zones orientées le plus défavorablement par rapport au clivage.



**Fig. V.14** : Comparaison des cartographies de  $\sigma_I$  (a) et  $\sigma_{\{100\}}$  (b) (agrégat n°1 à  $T = -150^\circ\text{C}$  /  $\chi = 2,5$ )

Les cartographies de  $\sigma_{\{100\}}$  ont été comparées entre les deux agrégats, ce qui permet d'étudier l'effet de la microstructure sur les hétérogénéités de  $\sigma_{\{100\}}$ . La figure V.15 suggère que les concentrations de  $\sigma_{\{100\}}$  sont très tributaires du choix de la microstructure, ce qui était déjà le cas pour les concentrations de  $\sigma_I$ .



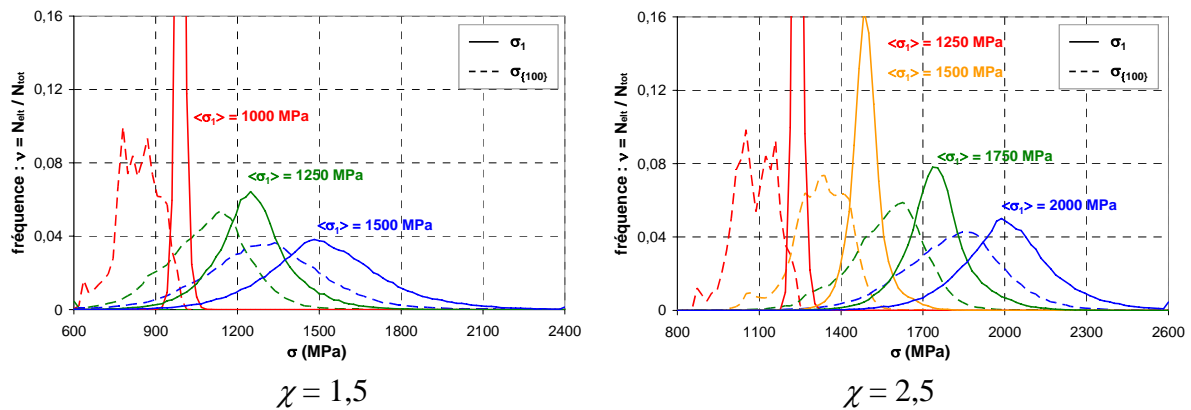
**Fig. V.15** : Comparaison des cartographies de  $\sigma_{\{100\}}$  entre les agrégats n°1 (a) et n°2 (b) ( $T = -150^\circ\text{C}$  /  $\chi = 1,5$ )

### c) Etude des distributions de $\sigma_{\{100\}}$ :

La comparaison des distributions de  $\sigma_{\{100\}}$  et  $\sigma_I$  vient confirmer les remarques déjà formulées dans le paragraphe précédent. Premièrement, un décalage apparaît clairement entre les distributions de  $\sigma_{\{100\}}$  et  $\sigma_I$  (cf. figure V.15). Ce décalage s'accroît lorsque la déformation moyenne augmente : pour les états les moins déformés, il y a chevauchement des queues de distributions de  $\sigma_{\{100\}}$  et de  $\sigma_I$ , ce qui n'est plus le cas des états les plus fortement déformés.

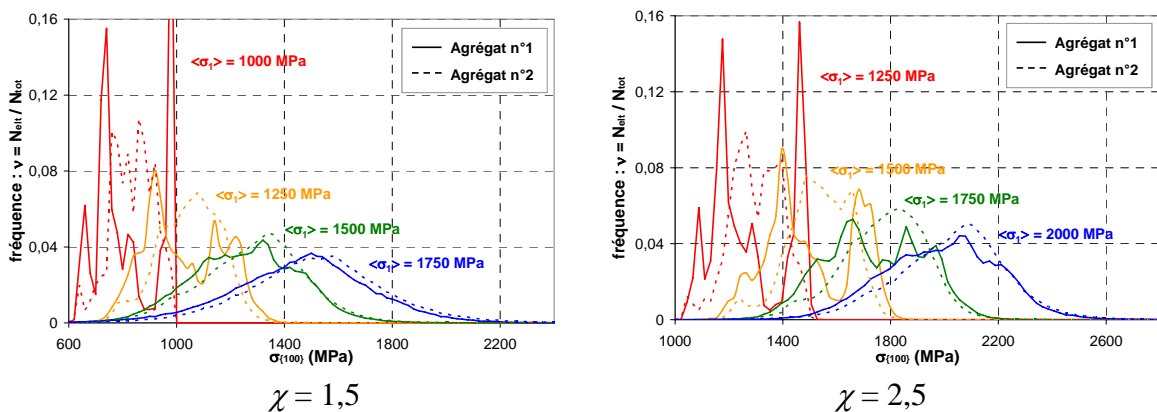
D'autre part, les distributions de  $\sigma_{\{100\}}$  sont beaucoup plus hétérogènes que celles de  $\sigma_I$ . Pour les états très peu déformés (et présentant une distribution de  $\sigma_I$  pratiquement homogène), l'allure des distributions de  $\sigma_{\{100\}}$  devient même erratique.

Enfin, les queues de distributions de  $\sigma_{\{100\}}$  et  $\sigma_I$  présentent une allure très différente : elles sont non seulement décalées, mais les distributions de  $\sigma_{\{100\}}$  sont beaucoup plus étalées que celles de  $\sigma_I$ . Cet effet semble toutefois s'estomper avec la déformation.



**Fig. V.16 :** Comparaison des distributions de  $\sigma_{\{100\}}$  avec celles de  $\sigma_I$  (agrégat n°1 /  $T = -150^\circ\text{C}$ )

Si, pour les états les moins déformés, les distributions de  $\sigma_{\{100\}}$  diffèrent nettement entre les deux agrégats, les distributions de  $\sigma_{\{100\}}$  deviennent assez proches pour les états les plus déformés (figure V.17). D'autre part, les distributions sont d'autant plus 'lissées' que la déformation est élevée : elles restent néanmoins plus erratiques que les distributions de  $\sigma_I$ . En définitive, la taille d'agrégat ne peut pas être considérée comme représentative vis à vis des distributions de  $\sigma_{\{100\}}$ , tout du moins pour les états peu déformés.



**Fig. V.17 :** Comparaison des distributions de  $\sigma_{\{100\}}$  entre les agrégats n°1 et n°2 ( $T = -150^\circ\text{C}$ )

En somme, la prise en compte des plans de clivage amène l'introduction d'un degré supplémentaire d'hétérogénéité mécanique. A l'hétérogénéité due à la concentration des contraintes vient s'ajouter une hétérogénéité d'orientations cristallographiques. Le profil erratique des distributions de  $\sigma_{\{100\}}$  pourrait tout à fait être interprété de la manière suivante : la microstructure est suffisamment représentative pour rendre compte de la distribution de  $\sigma_I$ ,

mais pas assez pour rendre compte de la distribution de  $\sigma_{l100}$ , qui résulte à la fois des champs mécaniques et de l'orientation des plans de clivage.

C'est en raison de ces profils de distribution erratiques que nous avons par la suite abandonné l'idée d'un critère quantitatif de représentation des hétérogénéités de  $\sigma_{l100}$ . Nous nous sommes concentrés sur la description des hétérogénéités de contraintes principales maximales  $\sigma_l$ , qui peut trouver une application assez directe dans les modèles d'approche locale de la rupture par clivage.

## V.C Quantification des hétérogénéités : identification de fonctions mathématiques de distribution de $\sigma_l$ à partir des résultats de simulation numérique

La démarche de quantification des hétérogénéités est entreprise en deux étapes :

- Dans un premier temps, une étude préliminaire est menée pour identifier de manière qualitative les paramètres clés pilotant l'évolution des hétérogénéités (paragraphe V.C.1) : le niveau d'hétérogénéité est assimilé à l'écart type relatif des valeurs de  $\sigma_l$  dans l'agrégat, noté  $\delta(\sigma_l)$ . Nous avons étudié l'effet de  $\langle \sigma_l \rangle$ ,  $\chi$ ,  $\langle \varepsilon_{eq} \rangle$  et  $\langle \sigma_{mises} \rangle$  sur l'évolution de  $\delta(\sigma_l)$ , ce qui a permis de mettre en évidence l'importance des déformations et contraintes équivalentes moyennes  $\langle \varepsilon_{eq} \rangle$  et  $\langle \sigma_{mises} \rangle$  sur l'évolution des hétérogénéités.
- Dans un second temps, nous avons identifié une fonction de distribution de type 'valeurs extrêmes' sur les résultats de simulation numérique (paragraphe V.C.2). Dans cette étude, nous avons utilisé les résultats de l'approche préliminaire pour identifier une relation entre les paramètres de la fonction et les variables  $\langle \sigma_l \rangle$ ,  $\langle \sigma_{mises} \rangle$  et  $T$ .

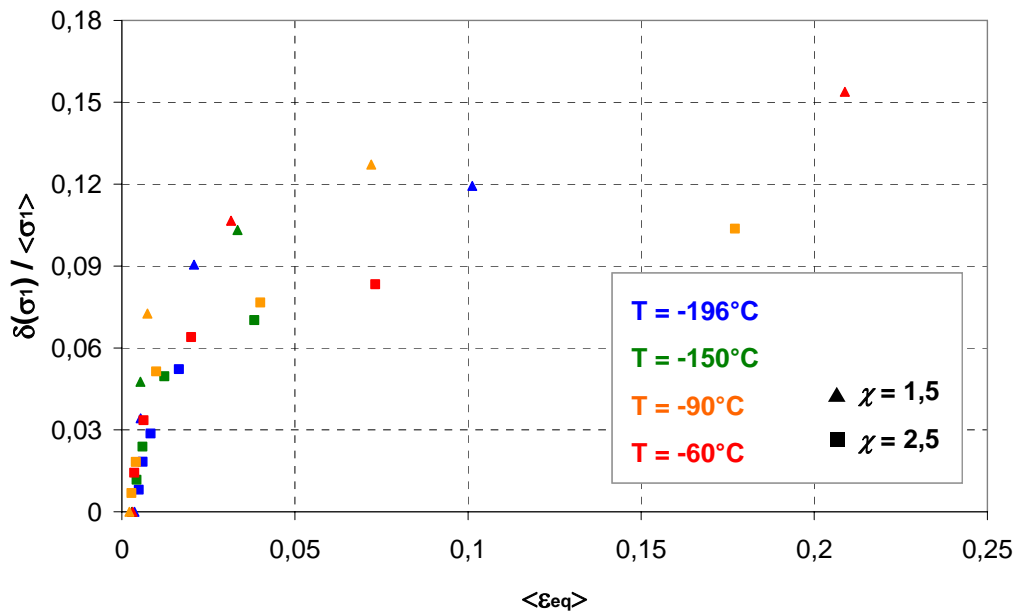
### V.C.1 Etude préliminaire

Afin de quantifier les hétérogénéités de  $\sigma_l$  dans la microstructure nous avons utilisé un critère de dispersion très simple. L'écart type des valeurs de  $\sigma_l$ , noté  $\Delta(\sigma_l)$ , mesure l'écart à la moyenne  $\langle \sigma_l \rangle$ , mais ce critère présente l'inconvénient d'être sensible à la valeur de  $\langle \sigma_l \rangle$ . C'est pour cette raison que nous nous sommes intéressés à l'écart type relatif  $\delta(\sigma_l)$ , qui est défini par :

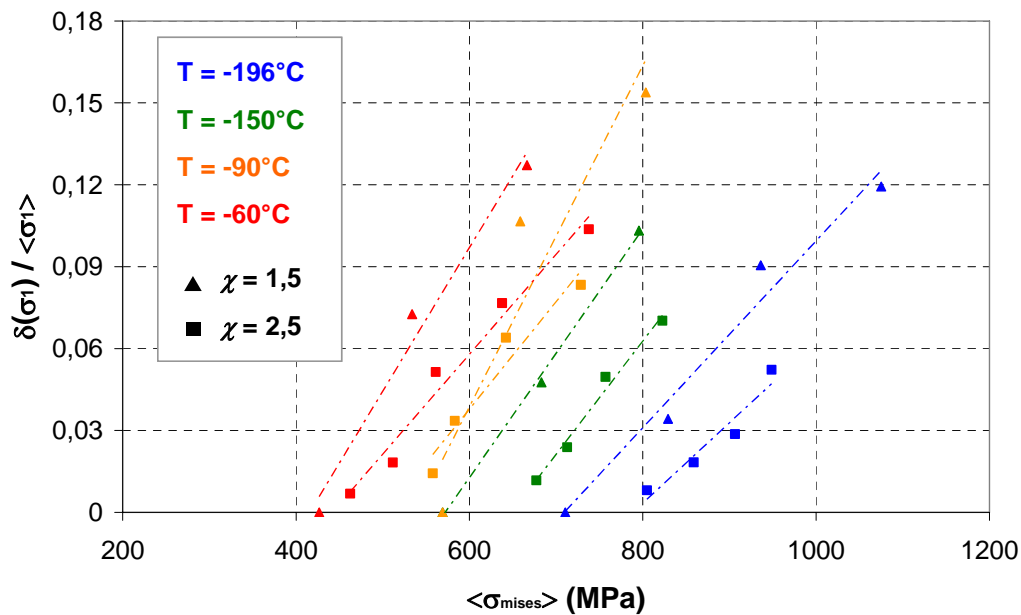
$$\delta(\sigma_l) = \frac{\Delta(\sigma_l)}{\langle \sigma_l \rangle} \quad (\text{V.15})$$

L'évolution de l'écart type a été étudiée en fonction de  $\langle \sigma_l \rangle$ ,  $\langle \sigma_{mises} \rangle$  et  $\langle \varepsilon_{eq} \rangle$  (cf. **annexe E.3**). On montre qu'il n'est pas possible de dégager de relation évidente entre  $\langle \sigma_l \rangle$  et  $\chi$  d'un côté et  $\delta(\sigma_l)$  de l'autre. En effet,  $\langle \sigma_l \rangle$  et  $\chi$  sont des grandeurs interdépendantes et il semble plus naturel de faire intervenir  $\langle \varepsilon_{eq} \rangle$  comme variable pilotant l'évolution de  $\delta(\sigma_l)$ .

Afin d'étudier l'effet de la déformation sur les hétérogénéités, et ce indépendamment de  $\sigma_I$ , nous avons représenté l'évolution de  $\delta(\sigma_I)$  directement en fonction de  $\langle \varepsilon_{eq} \rangle$  (figure V.18). Il semble bien y avoir une relation de type Hollomon (loi puissance) entre  $\delta(\sigma_I)$  et  $\langle \varepsilon_{eq} \rangle$ , mais la population de points est très dispersée, surtout pour les états très déformés. De plus, on ne dispose pas de beaucoup de points correspondant à  $\langle \varepsilon_{eq} \rangle > 10\%$ . On peut également supposer que la relation entre  $\delta(\sigma_I)$  et  $\langle \varepsilon_{eq} \rangle$  est dépendante de la température.



**Fig. V.18 :** Evolution de l'écart type de la variable  $\sigma_I$  rapporté à la moyenne en fonction de  $\langle \varepsilon_{eq} \rangle$  (agrégat n°1)



**Fig. V.19 :** Evolution de l'écart type de la variable  $\sigma_I$  rapporté à la moyenne en fonction de  $\langle \sigma_{mises} \rangle$  (agrégat n°1)



La figure V.19 suggère qu'il existe une relation linéaire entre  $\langle \sigma_{mises} \rangle$  et  $\delta(\sigma_I)$  : la température ne ferait que décaler la droite sans affecter le coefficient directeur. Ce type de paramétrisation est très séduisant car très simple.  $\langle \sigma_{mises} \rangle$  traduit l'effet de la déformation moyenne sur les hétérogénéités, tandis que  $T$  ne joue que sur l'ordonnée à l'origine de la droite :

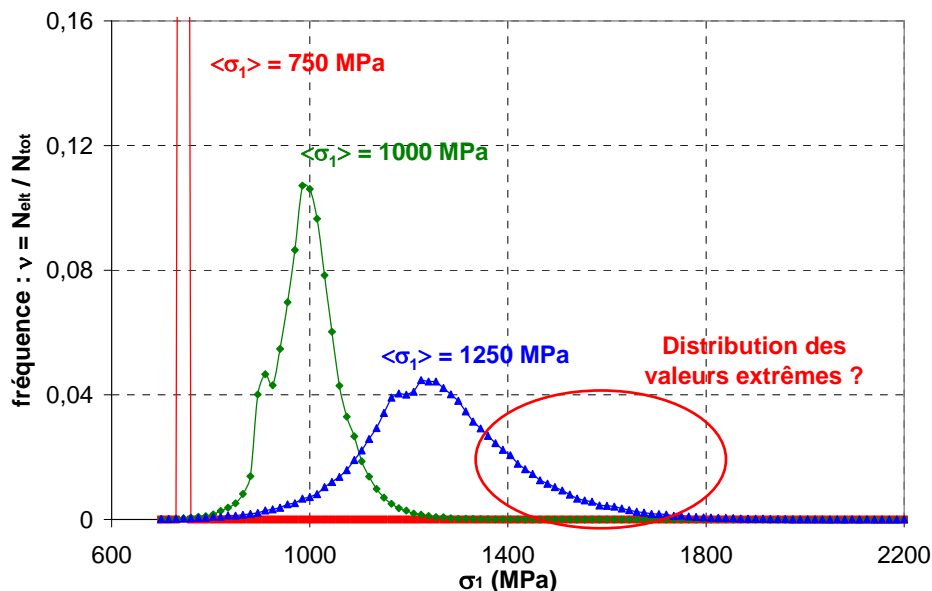
$$\delta(\sigma_I) = \alpha \langle \sigma_{mises} \rangle + \beta(T) \quad (V.16)$$

$\alpha$  désigne une constante,  $\beta$  un paramètre dépendant de  $T$ . Ces résultats semblent indiquer que la température décale la limite d'élasticité mais que, à déformation fixée,  $T$  ne joue pas significativement sur l'évolution des hétérogénéités de contraintes.

Même si cette approche préliminaire ne permet pas d'étudier spécifiquement les queues de distributions, elle apporte des informations importantes sur les paramètres à prendre en compte dans une approche plus quantitative. Cependant, ce type d'approche ne permet pas d'accéder à la distribution des valeurs extrêmes de  $\sigma_I$  dans la microstructure. Or, dans le cadre de la prévision de l'amorçage du clivage, ce sont précisément ces valeurs extrêmes de  $\sigma_I$  qui nous intéressent.

### V.C.2 Utilisation de distributions de type 'valeurs extrêmes'

Notre idée directrice consiste à approcher les distributions numériques de  $\sigma_I$  par des fonctions de distribution théoriques. L'identification des paramètres de la fonction étant réalisée indépendamment pour chaque état de chargement, la démarche consiste à corrélérer ces paramètres avec  $T$ ,  $\langle \sigma_I \rangle$ ,  $\chi$  ou  $\langle \epsilon_{eq} \rangle$  : l'objectif consiste à en déduire une description quantitative et générale de l'évolution des hétérogénéités de contraintes à l'échelle de la plasticité cristalline.



**Fig. V.20** : Intérêt de l'étude des queues de distributions dans le cadre de la modélisation de la rupture fragile par une approche locale

Dans le cadre de la prévision de l'amorçage de la rupture, il nous importe de bien décrire les valeurs extrêmes de  $\sigma_I$  dans l'agrégat, puisque la rupture va s'amorcer là où les contraintes

locales sont les plus élevées (figure V.20). C'est pour cette raison que nous avons identifié des fonctions mathématiques de type Gumbel de première et de seconde espèce [CAR99] : ces fonctions sont susceptibles de décrire la distribution des plus grandes valeurs de  $\sigma_I$  dans l'agrégat.

**a) Fonction de Gumbel de première espèce :**

Si on représente la distribution des valeurs de  $\sigma_I$  par une fonction de type Gumbel de première espèce, la probabilité que la contrainte principale  $\sigma$  soit inférieure à  $\sigma_I$  s'écrit :

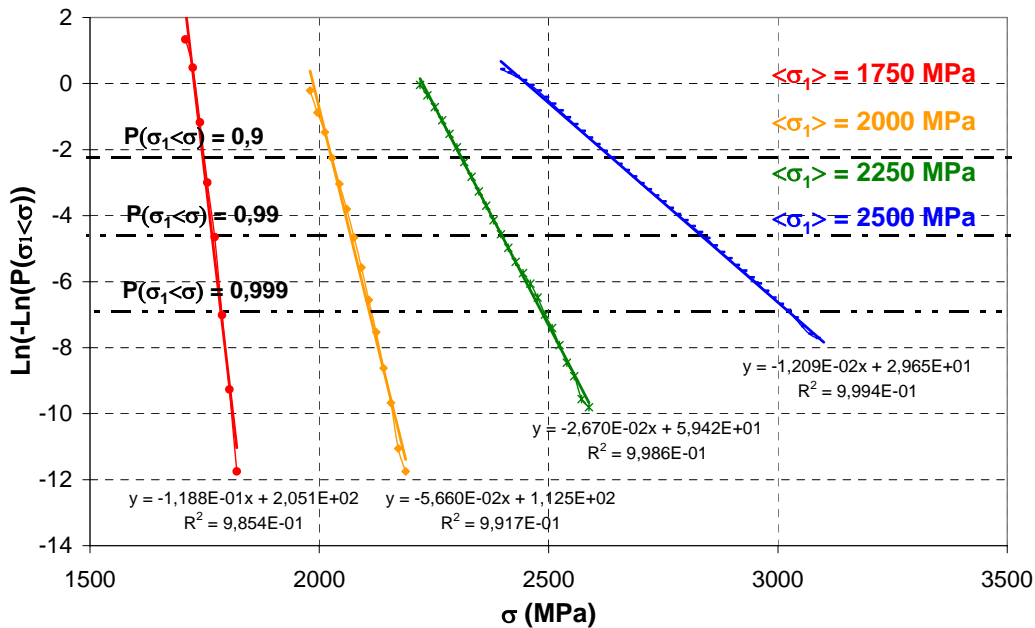
$$P(\sigma_I < \sigma) = \exp\left[-\exp\left(-\frac{\sigma - A}{B}\right)\right] \tag{V.17}$$

$A$  et  $B$  sont deux paramètres liés par la relation (V.18) à la contrainte principale moyenne  $\langle \sigma_I \rangle$  dans l'agrégat :

$$\langle \sigma_I \rangle = A - B \Gamma'(1) \tag{V.18}$$

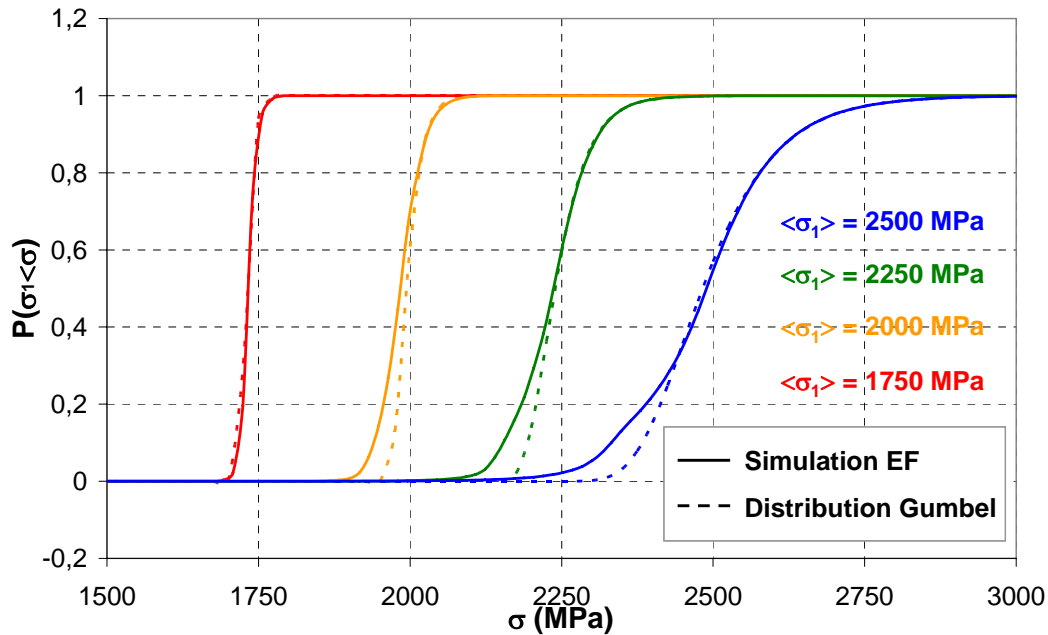
$\Gamma'(1)$  est la dérivée de la fonction  $\Gamma(n)$  pour  $n = 1$  et vaut 0,577. L'évolution des hétérogénéités de  $\sigma_I$  peut donc être représentée par le seul paramètre  $B$ .

Pour chaque état de chargement, un jeu de paramètres  $A$  et  $B$  est identifié à partir de la distribution des valeurs de  $\sigma_I$ . Bien que  $A$  et  $B$  soient deux paramètres liés, ils sont identifiés indépendamment l'un de l'autre, la validité de la relation (V.18) n'étant testée qu'*a posteriori*.  $A$  et  $B$  sont identifiés par linéarisation de l'équation (V.17). L'identification de  $A$  et  $B$  porte uniquement sur les queues de distribution : on ne prend en compte que la fraction de la population d'éléments pour lesquels  $P(\sigma < \sigma_I) > 0,7$  (cf. figure V.21).



**Fig. V.21 :** Identification des paramètres  $A$  et  $B$  de la fonction de Gumbel de première espèce dans l'agrégat n°1  $\{T = -196^\circ\text{C}, \chi = 2,5\}$

Les résultats sont détaillés dans l'**annexe E.4.b**. Pour chaque simulation numérique et chaque état de chargement, on montre qu'il existe un jeu de paramètres satisfaisant les distributions simulées de  $\sigma_I$ . L'accord entre les distributions simulées et les fonctions de Gumbel est très bon, surtout dans le domaine des queues de distribution. Les distributions données par la fonction de Gumbel, ainsi que les distributions simulées, sont représentées sur la figure V.22 pour différents niveaux de  $\langle \sigma_I \rangle$ . L'accord entre les deux distributions est satisfaisant lorsque  $P(\sigma_I < \sigma) > 0,6$ , c'est-à-dire dans le domaine d'identification des paramètres  $A$  et  $B$ .



**Fig. V.22 :** Identification de fonctions de Gumbel de première espèce sur les hétérogénéités de  $\sigma_I$  simulées numériquement dans l'agrégat n°1  $\{T = -196^\circ\text{C}, \chi = 2,5\}$

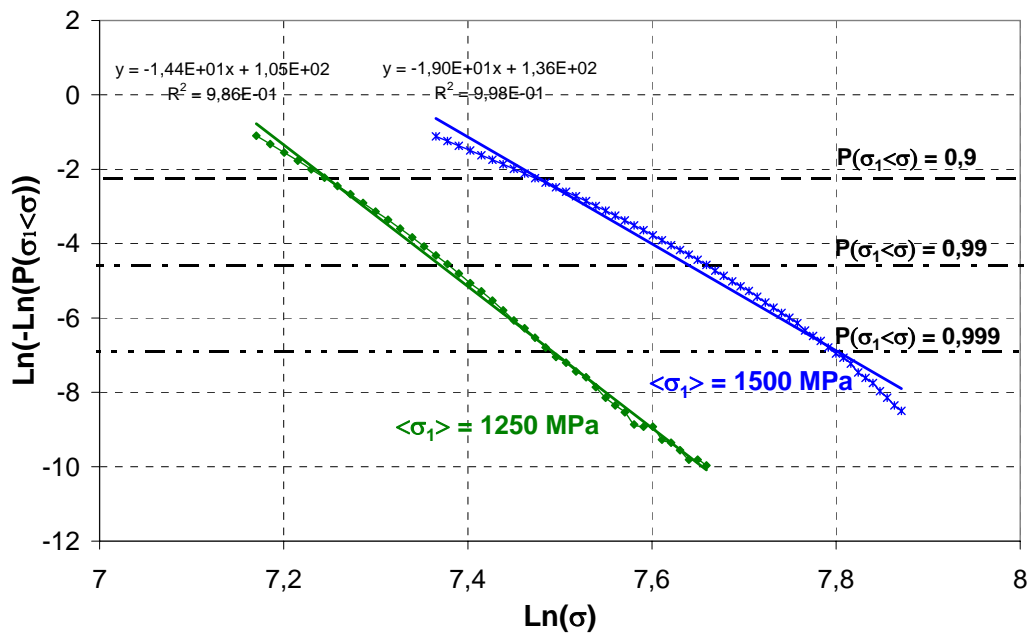
Dans l'expression de  $P(\sigma_I < \sigma)$  (équation (V.17)), le paramètre  $B$  traduit l'évolution des hétérogénéités dans l'agrégat. Afin de décrire simplement l'évolution des hétérogénéités dans l'agrégat, il reste maintenant à relier  $B$  aux paramètres de chargement :  $T$ ,  $\chi$ ,  $\langle \sigma_I \rangle$ ,  $\langle \sigma_{mises} \rangle$  ou  $\langle \varepsilon_{eq} \rangle$ .

### b) Fonction de Gumbel de seconde espèce :

Nous avons également identifié des fonctions de distribution de Gumbel de seconde espèce sur les résultats de simulation numérique. L'expression de la fonction de deuxième espèce fait intervenir deux paramètres  $A$  et  $m$  :

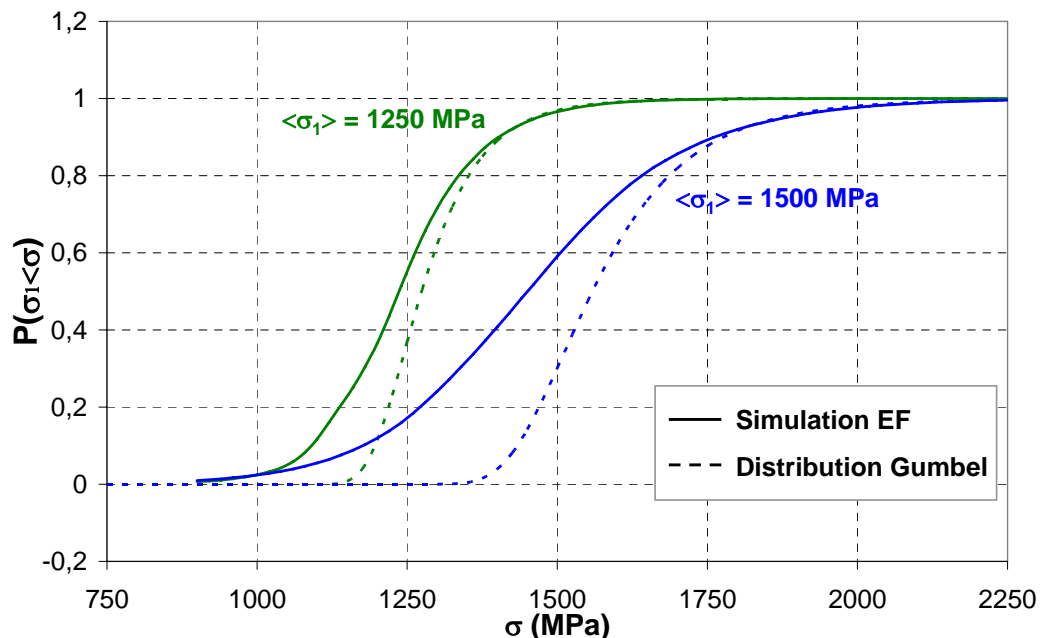
$$P(\sigma_I < \sigma) = \exp\left(-\left(\frac{A}{\sigma}\right)^m\right) \quad (\text{V.19})$$

$A$  est relié à la contrainte principale moyenne  $\langle \sigma_I \rangle$  dans l'agrégat, tandis que l'exposant  $m$  traduit le niveau d'hétérogénéité de la distribution. Comme pour la fonction de première espèce, nous avons linéarisé l'équation (V.19) afin de déterminer un jeu de paramètres  $A$  et  $m$  qui satisfait les distributions de  $\sigma_I$  pour chaque état de chargement (cf. figure V.23).



**Fig. V.23 :** Identification des paramètres  $A$  et  $m$  de la fonction de Gumbel de seconde espèce pour l'agrégat n°1 ( $T = -196^\circ\text{C}$ ,  $\chi = 2,5$ )

Les résultats sont détaillés dans l'annexe E.4.e : l'accord avec les distributions simulées numériquement est d'autant plus satisfaisant que  $T$  est faible ou  $\chi$  élevé. Par contre, les fonctions de distributions de deuxième espèce ne parviennent pas à décrire de façon satisfaisante les simulations à  $T = -60^\circ\text{C}$  ou  $-90^\circ\text{C}$  et lorsque  $\chi = 1,5$  (figure V.24).



**Fig. V.24 :** Identification de fonctions de Gumbel de seconde espèce sur les hétérogénéités de  $\sigma_1$  simulées numériquement ( $T = -90^\circ\text{C}$ ,  $\chi = 1,5$ , agrégat n°1)

Même si la fonction de distribution de seconde espèce ne permet de décrire l'évolution des hétérogénéités pour toutes les valeurs de  $T$  et  $\chi$ , nous avons tenté de relier le paramètre  $m$  aux

paramètres  $\langle \sigma_I \rangle$ ,  $\langle \sigma_{mises} \rangle$ ,  $\langle \varepsilon_{eq} \rangle$  et  $T$  (cf. **annexe E.4.e**). Par la suite, en raison des problèmes évoqués plus haut, nous utiliserons la fonction de Gumbel de première espèce pour décrire l'évolution des hétérogénéités de  $\sigma_I$ .

### V.C.3 Définition et paramétrisation d'une fonction de distribution décrivant l'évolution des hétérogénéités de $\sigma_I$

#### a) Identification d'une loi d'évolution du paramètre $B$ en fonction de $\langle \sigma_{mises} \rangle$ et $T$ :

Dans l'expression de la fonction de Gumbel de première espèce, le paramètre  $B$  décrit l'évolution des hétérogénéités de  $\sigma_I$  dans la microstructure. Afin de définir une loi d'évolution de  $B$  en fonction des différents paramètres du chargement mécanique, nous nous sommes basés sur les résultats de l'étude préliminaire présentée au chapitre V.C.1. D'une part, cette étude a montré que l'évolution des hétérogénéités ne pouvait pas être décrite uniquement en fonction de  $\langle \sigma_I \rangle$ . La figure V.25 montre qu'il n'y a pas de lien évident entre  $\langle \sigma_I \rangle$  et  $B$ , et que d'autres paramètres, comme  $T$  et  $\chi$  doivent entrer en ligne de compte.

Nous avons également étudié l'évolution de  $B$  en fonction de  $\langle \varepsilon_{eq} \rangle$  (figure V.26). Comme pour l'écart type relatif  $\delta(\sigma_I)$ , on devine une relation liant  $B$  à  $\langle \varepsilon_{eq} \rangle$ , mais les valeurs de  $B$  demeurent très dispersées. L'étude détaillée, présentée dans l'**annexe E.4.c**, montre toute la difficulté d'identifier une relation entre  $B$  et  $\langle \varepsilon_{eq} \rangle$ . Il n'est pas possible d'identifier convenablement une loi de type puissance, et l'identification d'une fonction logarithmique pose problème. Pour toutes ces raisons, nous n'avons pas fait intervenir directement  $\langle \varepsilon_{eq} \rangle$  comme variable pilotant l'évolution des hétérogénéités.

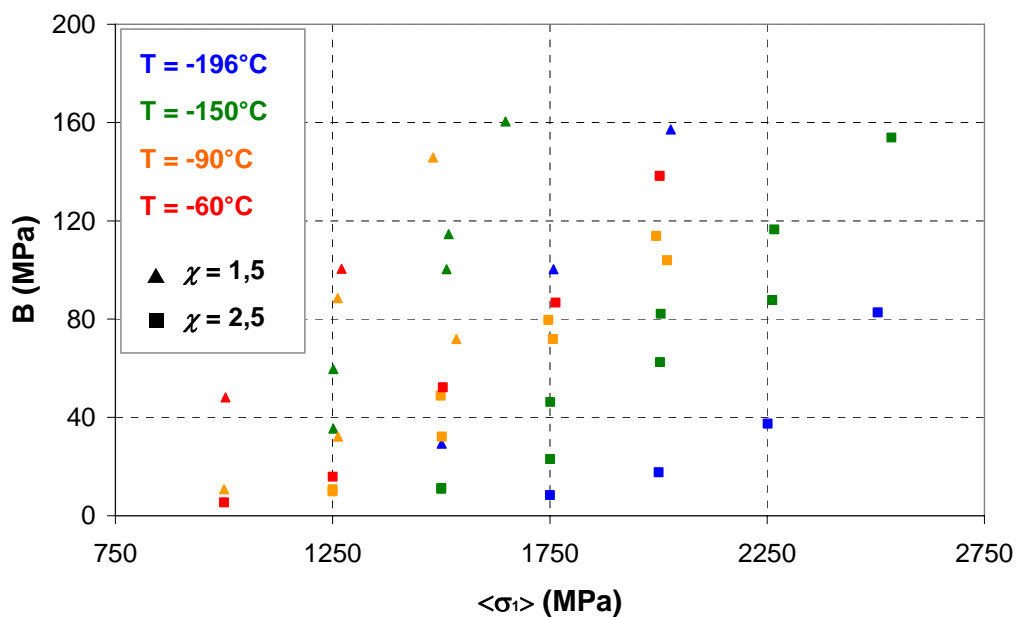


Fig. V.25 : Evolution du paramètre  $B$  en fonction de  $\langle \sigma_I \rangle$  (agrégats n°1 et n°2)

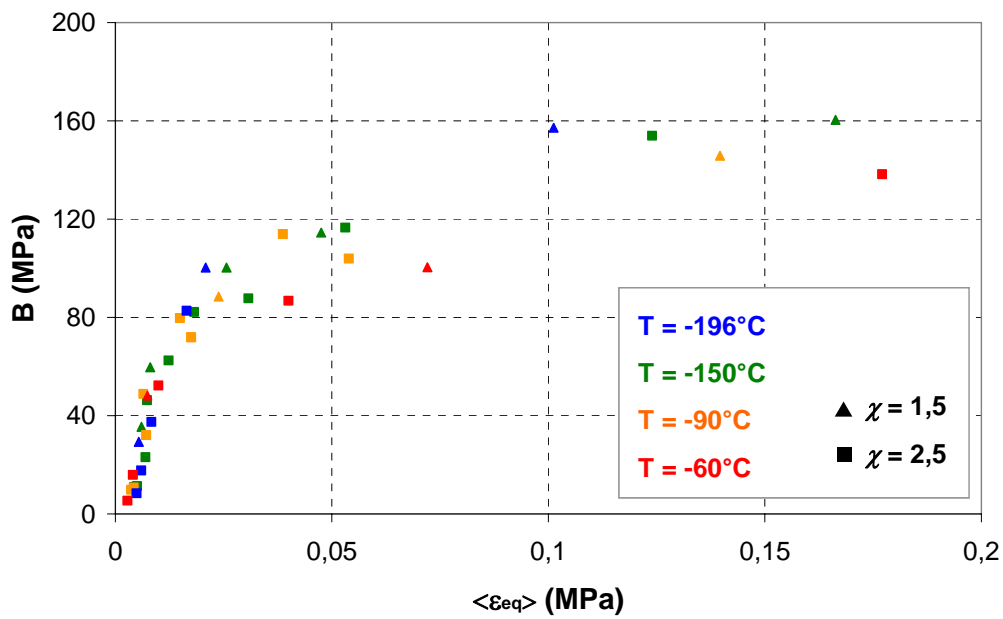


Fig. V.26 : Evolution du paramètre  $B$  en fonction de  $\langle \varepsilon_{eq} \rangle$  (agrégats n°1 et n°2)

$B$  a également été exprimé en fonction de la contrainte équivalente moyenne  $\langle \sigma_{mises} \rangle$  (figure V.27) : comme pour  $\delta(\sigma_I)$ , la corrélation entre  $B$  et  $\langle \sigma_{mises} \rangle$  est bien de type linéaire.

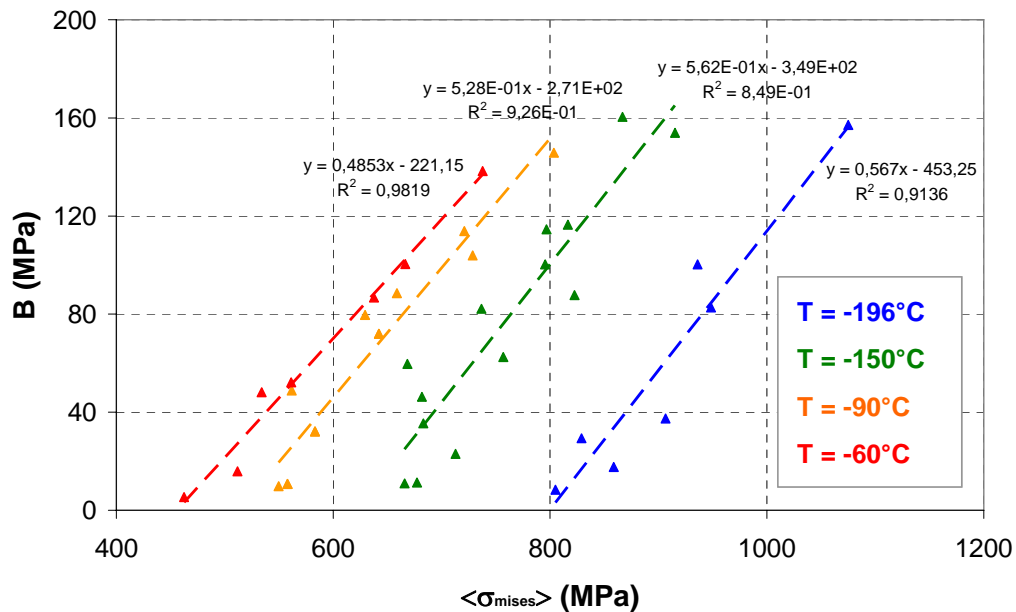


Fig. V.27 : Evolution du paramètre  $B$  en fonction de  $\langle \sigma_{mises} \rangle$  (agrégats n°1 et n°2)

En conséquence, nous proposons d'utiliser la loi suivante pour décrire l'évolution du paramètre  $B$  :

$$B(\sigma_{mises}, T) = \alpha \langle \sigma_{mises} \rangle + \beta(T) \quad (\text{V.20})$$

L'ordonnée à l'origine  $\beta$  est une fonction décroissante de la température  $T$ . A l'inverse le coefficient directeur  $\alpha$  de la droite ne semble pas dépendre fortement de  $T$  : il croît de  $\alpha = 0,49$  à  $-60^\circ\text{C}$  à  $\alpha = 0,57$  à  $-196^\circ\text{C}$ .

L'expression (V.20) n'est valable qu'en plasticité, ce qui correspond, dans l'expression de  $P(\sigma_I < \sigma)$  à la condition  $B > 0$ .,  $B$  tend vers 0 lorsque la distribution des contraintes est homogène). L'équation (V.20) n'est vérifiée que lorsque  $\langle \sigma_{mises} \rangle$  excède la limite d'élasticité macroscopique  $\sigma_Y$ .

Le tableau V.1 donne les valeurs de  $\alpha$  et  $\beta$  identifiées par régression linéaire à partir de la figure V.27. On constate que  $\beta$  dépend fortement de la température, et que les valeurs de  $\alpha$  sont d'autant plus élevées que  $T$  est faible.

$T$ ( $^\circ\text{C}$ )	$\alpha$	$\beta$ (MPa)
-196 $^\circ\text{C}$	0,567	-453
-150 $^\circ\text{C}$	0,562	-349
-90 $^\circ\text{C}$	0,528	-271
-60 $^\circ\text{C}$	0,485	-221

**Tableau V.1** : Identification de la loi  $B = \alpha T + \beta$  à différentes températures

Si on combine les équations (V.17), (V.18) et (V.20), la fonction de distribution des valeurs de  $\sigma_I$  dans la microstructure s'exprime :

$$P(\sigma < \sigma_I) = 1 - \exp \left[ - \exp \left( - \frac{\sigma_I - \langle \sigma_I \rangle}{\alpha \langle \sigma_{mises} \rangle + \beta(T)} + \Gamma'(1) \right) \right] \quad (\text{V.21})$$

Avec  $\Gamma(1) = 0,577$ . Il nous reste à caractériser la dépendance de  $\beta$  vis à vis de  $T$  et éventuellement de  $\sigma_Y$ . Ce type de paramétrisation permettrait de décrire d'une manière simple et assez générale l'évolution des hétérogénéités de  $\sigma_I$  dans la microstructure.

### b) Formulation d'une loi d'évolution des hétérogénéités :

Nous disposons de simulations réalisées à 4 températures différentes : par conséquent, il est impossible d'identifier précisément une loi décrivant l'évolution du paramètre  $\beta$  en fonction de  $T$ . Dans l'équation (V.20), la limite d'élasticité correspond au cas de figure  $B = 0$ , ce qui nous permet d'exprimer la limite d'élasticité  $\sigma_Y$  en fonction de  $\alpha$  et  $\beta$  :

$$\sigma_Y = - \frac{\beta}{\alpha} \quad (\text{V.22})$$

En principe, le rapport  $-\beta/\alpha$  doit pouvoir s'identifier à la limite d'élasticité expérimentale. Toutefois, les paliers de type Lüders observés au début des courbes de traction expérimentales à  $-196^\circ\text{C}$ ,  $-150^\circ\text{C}$  et  $-90^\circ\text{C}$  ne facilitent pas la comparaison entre  $\sigma_Y$  et la limite d'élasticité en traction : en effet, les phénomènes de vieillissement statique ne sont pas reproduits par notre

modèle micromécanique. D'autre part, on montre dans l'**annexe E.4.d** que les valeurs de  $\sigma_Y$  à  $-60^\circ\text{C}$  et  $-90^\circ\text{C}$  semblent trop faibles par rapport à la limite d'élasticité expérimentale. En utilisant l'équation (V.22), la loi d'évolution des hétérogénéités pourrait finalement s'écrire :

$$B = \alpha \left( \langle \sigma_{mises} \rangle - \sigma_Y \right) \quad \text{si} \quad \langle \sigma_{mises} \rangle > \sigma_Y$$

$$B = 0 \quad \text{sinon} \quad (V.23)$$

En première approximation,  $\alpha$  peut être considéré comme indépendant de  $T$ , l'évolution en température des hétérogénéités est alors entièrement portée par  $\langle \sigma_{mises} \rangle$ , tandis que  $\sigma_Y$  traduit un décalage en température de l'entrée en plasticité.

Sans faire intervenir  $\sigma_Y$ , il est toujours possible de décrire directement l'évolution du paramètre  $\beta$  en supposant une dépendance de type Arrhénius :

$$\beta(T) = -\beta_0 \exp\left(-\frac{E_a}{k_B T}\right) \quad (V.24)$$

$E_a$  désigne une énergie d'activation,  $\beta_0$  désignant un terme pré-exponentiel. L'identification de ces 2 paramètres est présentée dans l'**annexe E.4.d** : on obtient  $\beta_0 = 170 \text{ MPa}$  et  $E_{gc} = 6,9 \cdot 10^{-3} \text{ eV}$ . Toutefois, une identification plus fine de  $\beta(T)$  nécessiterait la réalisation de calculs de microstructure supplémentaires avec d'autres valeurs de  $T$ .



## Conclusion du chapitre V

### Choix de l'agrégat et conditions aux limites :

- conditions aux limites : les conditions aux limites sont de type déformations planes. Les conditions aux limites sont pilotées en contraintes de façon à imposer le niveau de triaxialité moyen  $\chi$  dans l'agrégat. Le cas de figure  $\chi = 2,5$  correspond à la triaxialité rencontrée en fond de fissure dans une éprouvette CT.
- choix de l'agrégat : l'étude EBSD présentée dans le chapitre III montre qu'un domaine ne peut être considéré comme cristallographiquement représentatif de la microstructure bainitique que pour une taille supérieure à  $300 \times 300 \mu\text{m}^2$ . Cependant, notre approche de simulation numérique n'est pas compatible avec une telle taille de domaine. De plus, le volume de l'agrégat doit être approximativement égal au volume élémentaire de l'approche locale de la rupture :  $V_0 = (50 \mu\text{m})^3$ . Nous avons donc choisi une taille d'agrégat de  $200 \times 200 \times 3 \mu\text{m}^3$ . Afin de juger a posteriori de la représentativité de cette taille, nous comparons les distributions de  $\sigma_1$  entre deux agrégats cristallographiquement différents.

### Etude qualitative de l'évolution des hétérogénéités de $\sigma_1$ :

- Effet de  $T$ ,  $\chi$  et  $\langle \varepsilon_{eq} \rangle$  : l'étude de l'évolution des distributions de  $\sigma_1$  montre que l'étalement des distributions de  $\sigma_1$  augmente avec la température  $T$  et diminue avec la triaxialité  $\chi$ . Sans surprise, les hétérogénéités de  $\sigma_1$  sont d'autant plus fortes que  $\langle \sigma_1 \rangle$  est élevée. Les paramètres  $T$ ,  $\chi$  et  $\langle \sigma_1 \rangle$  jouent sur la déformation équivalente  $\langle \varepsilon_{eq} \rangle$ , que plusieurs auteurs ont relié à l'évolution des hétérogénéités des champs locaux [LIN97] [SEK04].
- Comparaison agrégat n°1 / n°2 : les résultats montrent que les distributions de  $\sigma_1$  sont très proches entre les deux agrégats. Ce résultat suggère que la taille  $200 \times 200 \times 3 \mu\text{m}^3$  est représentative vis-à-vis des distributions de  $\sigma_1$ .
- Comparaison  $\sigma_1 / \sigma_{\{100\}}$  : les distributions de  $\sigma_{\{100\}}$  sont très différentes de celles de  $\sigma_1$ , et elles présentent un aspect bruité : on peut supposer que la description des hétérogénéités de  $\sigma_{\{100\}}$  nécessiterait d'utiliser des agrégats de plus grande taille ( $300 \times 300 \mu\text{m}^2$ ), plus représentatifs cristallographiquement.

### Etude quantitative : utilisation des de fonctions de distribution de types valeurs 'extrêmes' (Gumbel) :

- Fonction de Gumbel de 1<sup>ère</sup> espèce : les résultats montrent que les distributions de  $\sigma_1$  suivent une distribution de type Gumbel de première espèce, et que les paramètres de cette fonction peuvent être corrélés simplement avec la contrainte équivalente moyenne

$\langle \sigma_{mises} \rangle$  et  $T$ . On obtient une description statistique très générale, valable quel que soit l'état de chargement mécanique :

$$P(\sigma < \sigma_l) = 1 - \exp \left[ - \exp \left( - \frac{\sigma_l - \langle \sigma_l \rangle}{\alpha \langle \sigma_{mises} \rangle + \beta(T)} + \Gamma'(l) \right) \right]$$

Cette fonction dépend de  $\langle \sigma_l \rangle$ ,  $\langle \sigma_{mises} \rangle$  et  $T$  à travers le paramètre  $\beta$ . Le paramètre  $\alpha$  décroît légèrement lorsque la température augmente. Il est également possible d'éliminer  $\langle \sigma_{mises} \rangle$  et d'écrire  $P(\sigma < \sigma_l)$  comme étant fonction de  $\langle \sigma_l \rangle$ ,  $\chi$  et  $T$ . D'autre part, d'autres calculs de microstructure seraient nécessaires pour affiner la dépendance  $\beta(T)$ .

- Fonction de Gumbel de 2<sup>nde</sup> espèce : à l'opposé, les distributions de Gumbel de seconde espèce ne permettent pas de décrire correctement les distributions simulées de  $\sigma_l$ .

## Références bibliographiques

[BAR05] BARCELO (F.), BECHADE (J. L.), PELE (J.) – *Détermination du Volume Elementaire Représentatif d'un acier de cuve 16MND5*. – Document Technique du Département des Matériaux pour le Nucléaire (DMN), CEA Saclay, 2005.

[CAR99] CARASSOU (S.) – *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, 1999.

[LIN97] LINEAU (C.) – *Analyse expérimentale de la déformation plastique d'un polycristal d'acier. Comparaison avec simulations de modèles polycristallins*. Thèse de Doctorat, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, 1997.

[MAC64] MACKENZIE (J. K.) – *The distribution of rotation axes in a random aggregate of cubic crystals*. Acta Metallurgica, vol. n°12, Issue 2, pp. 223-225, 1964.

[MAT06] MATHIEU (J. P.) – *Analyse et modélisation micro-mécanique du comportement et de la rupture fragile de l'acier 16MND5 : prise en compte des hétérogénéités microstructurales* – Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Arts et Métiers, CER de Metz, 2006.

[SEK04] SEKFALI (S.) – *Influence de la microstructure sur le comportement local dans les aciers 16MND5*. Thèse de Doctorat, Ecole Centrale Paris, 2004.

## Chapitre VI

### **Prise en compte des hétérogénéités mécaniques dans un modèle d'approche locale de la rupture par clivage**

## TABLE DES MATIÈRES

### VI. Prise en compte de l'évolution des hétérogénéités dans un critère d'approche locale de la rupture fragile

<b>Introduction .....</b>	<b>174</b>
<b>VI.A Etude bibliographique des mécanismes de rupture par clivage dans les aciers faiblement alliés .....</b>	<b>174</b>
<i>VI.A.1 Le mécanisme élémentaire de la rupture par clivage transgranulaire.....</i>	<i>175</i>
<i>VI.A.2 Les mécanismes d'amorçage du clivage : rôle de la déformation plastique locale .....</i>	<i>176</i>
<i>VI.A.3 Rôle joué par les défauts et la microstructure .....</i>	<i>180</i>
<i>VI.A.4 Rôle joué par les paramètres de chargement.....</i>	<i>183</i>
<b>VI.B Les théories d'approche locale de la rupture.....</b>	<b>187</b>
<i>VI.B.1 La modélisation RKR .....</i>	<i>187</i>
<i>VI.B.2 La théorie du maillon le plus faible .....</i>	<i>188</i>
<i>VI.B.3 Modèle de Beremin et modèles dérivés .....</i>	<i>189</i>
<b>VI.C Formulation d'un modèle statistique de rupture par clivage basé uniquement sur les hétérogénéités de <math>\sigma_I</math> dans la microstructure .....</b>	<b>197</b>
<i>VI.C.1 Présentation du modèle.....</i>	<i>197</i>
<i>VI.C.2 Application du critère.....</i>	<i>200</i>
<i>VI.C.3 Comparaison avec les résultats donnés par les modèles d'approche locale de la rupture.....</i>	<i>202</i>
<b>VI.D Application d'un critère d'amorçage du clivage tenant compte des hétérogénéités de <math>\sigma_I</math> et de la distribution des tailles de carbures.....</b>	<b>206</b>
<i>VI.D.1 Ecriture du critère d'amorçage du clivage.....</i>	<i>206</i>
<i>VI.D.2 Evolution de la probabilité d'amorçage <math>dP_{R0}(r_c)</math> en fonction de <math>\langle \sigma_I \rangle</math>, <math>T</math>, <math>\chi</math> et <math>\langle \mathcal{E}_{eq}^p \rangle</math> .....</i>	<i>207</i>
<i>VI.D.3 Evolution de <math>P_{R0}</math> en fonction de <math>\langle \sigma_I \rangle</math>, <math>\langle \mathcal{E}_{eq} \rangle</math> et <math>T</math> : comparaison des résultats avec ceux du modèle de Beremin .....</i>	<i>214</i>

<b>Conclusion du chapitre VI.....</b>	<b>221</b>
<b>Références bibliographiques .....</b>	<b>224</b>

## **Introduction**

Deux types de ruptures sont observés dans les aciers faiblement alliés : la rupture ductile par germination, croissance puis coalescence de cavités aux hautes températures, et la rupture fragile par clivage transgranulaire aux températures plus basses. Il existe un régime de transition en énergie de rupture, qui est marqué par la présence simultanée de ces deux mécanismes qui entrent en compétition [LEC06\_II].

La modélisation micro-mécanique du comportement proposée dans le chapitre V s'appuie sur les mécanismes de plasticité intervenant aux basses températures. Dans ce chapitre, nous introduisons l'effet des mécanismes de plasticité 'basse température' dans un modèle d'approche locale de la rupture fragile.

Le chapitre s'articule autour de deux grandes parties :

- Dans la première partie est présentée une synthèse des mécanismes de rupture par clivage et des modèles d'approche locale déjà existants.
- Dans la seconde partie, nous présentons une approche qui exploite les résultats de modélisation du comportement local de l'acier de cuve. Nous tentons d'apporter des éléments de réponse quant à l'effet des hétérogénéités locales sur la rupture par clivage (effet de la température, de la triaxialité, de la déformation).

### **VI.A Etude bibliographique des mécanismes de rupture par clivage dans les aciers faiblement alliés**

La première partie du chapitre VI présente une revue bibliographique synthétique des mécanismes de rupture fragile :

- Dans un premier temps, on présente le mécanisme élémentaire de clivage, ainsi que la nécessité de trouver des amplificateurs de contraintes pour déclencher puis propager la rupture brutale.
- Par la suite, on présente les modèles classiques d'amorçage du clivage par amplification locale des contraintes. Ces amplificateurs sont de deux natures : les empilements de dislocations et les défauts présents dans la microstructure.
- La dernière partie de l'étude bibliographique s'intéresse à l'effet des paramètres de chargement (température, triaxialité) sur la rupture par clivage.

## VI.A.1 Le mécanisme élémentaire de la rupture par clivage transgranulaire

### a) La contrainte théorique de clivage

Le clivage correspond à la décohésion des plans cristallographiques par rupture des liaisons entre les atomes. On peut montrer que la contrainte locale théorique nécessaire pour casser les liaisons atomiques s'écrit [FPZ93] :

$$\sigma_c = \sqrt{\frac{E \gamma_s}{d_{\{hkl\}}}} \quad (\text{VI.1})$$

$E$  désignant le module d'Young du matériau,  $\gamma_s$  l'énergie de cohésion surfacique des atomes et  $d_{\{hkl\}}$  la distance inter-réticulaire des familles de plans d'indice  $\{hkl\}$ . Cette description très théorique du mécanisme de clivage permet d'expliquer simplement pourquoi le clivage est généralement observé sur les plans  $\{100\}$ . En effet, la contrainte de clivage sur un plan d'indice  $\{hkl\}$  est d'autant plus probable que le rapport  $\gamma_s / d_{\{hkl\}}$  est faible. Dans les métaux de structure cubique centrée, ce rapport est minimal pour les 3 plans de famille  $\{100\}$ . Cette description très théorique du mécanisme de clivage permet ainsi d'interpréter les observations expérimentales.

Dans les aciers à matrice ferritique, il est possible de calculer l'ordre de grandeur de la contrainte  $\sigma_c$  en prenant quelques valeurs caractéristiques :

- $E = 210000 \text{ MPa}$
- $\gamma_s \approx 1 \text{ J m}^{-2}$
- $d_{\{100\}} = 2 b / \sqrt{3} \approx 2,9 \cdot 10^{-10} \text{ m}$

Ces valeurs conduisent à une contrainte critique  $\sigma_c$  de l'ordre de 27000 MPa ( $\approx E / 10$ ). Cette prédiction théorique est vérifiée dans les whiskers, qui constituent des matériaux très purs et qui contiennent très peu de dislocations. Par contre, cette valeur est supérieure de plus d'un ordre de grandeur aux contraintes locales requises pour déclencher le clivage dans la ferrite [BIG58].

Pour expliquer l'apparition de micro-fissures de clivage dans les aciers, il faut nécessairement supposer l'existence de défauts jouant le rôle d'amplificateurs de contraintes locales. Certains de ces défauts conduisent à l'amorçage de micro-fissures de clivage. La propagation de ces micro-fissures dans la microstructure conduit à la rupture du matériau. Dans les aciers de cuve, l'amorçage sur les micro-défauts constitue l'étape critique du mécanisme de rupture par clivage.

Deux principaux facteurs sont à l'origine de l'amplification des contraintes :

- La déformation plastique locale : l'empilement des dislocations sur des obstacles peut augmenter la contrainte locale et favoriser l'apparition de microfissures de clivage. La formation de dislocations sessiles peut également expliquer l'amplification locale des contraintes.



- La présence de précipités ( $\text{Fe}_3\text{C}$ ,  $\text{MnS}$ ) : au cours de la déformation, la rupture du précipité ou la décohésion précipité / matrice conduisent à la formation de micro-défauts qui vont amplifier les contraintes locales.

### b) Le critère de Griffith

Par une analyse énergétique, Griffith [GRI20] formule un critère de stabilité d'une fissure circulaire de rayon  $r_c$ . La fissure se propage lorsque le travail nécessaire à l'extension de la fissure devient plus faible que le travail exercé par la contrainte d'ouverture locale. La relation (VI.2) donne l'expression de la contrainte d'ouverture critique  $\sigma_c$ , qui correspond à une propagation instable de la micro-fissure :

$$\sigma_c = \sqrt{\frac{\pi E^* \gamma_s}{2 r_c}} \quad (\text{VI.2})$$

- $E^* = E$  pour un état en contraintes planes
- $E^* = \frac{E}{1-\nu^2}$  pour un état en déformations planes

L'état de déformations planes étant plus pénalisant du point de vue de la stabilité des défauts ; on utilise en général la relation :

$$\sigma_c = \sqrt{\frac{\pi E \gamma_s}{2(1-\nu^2)r_c}} \quad (\text{VI.3})$$

L'effet du travail plastique peut être pris en compte en introduisant une énergie de surface effective  $\gamma_{eff}$  qui est fonction de  $\gamma_s$  et d'un terme plastique  $\gamma_p$  :

$$\gamma_{eff} = \gamma_s + \gamma_p \quad (\text{VI.4})$$

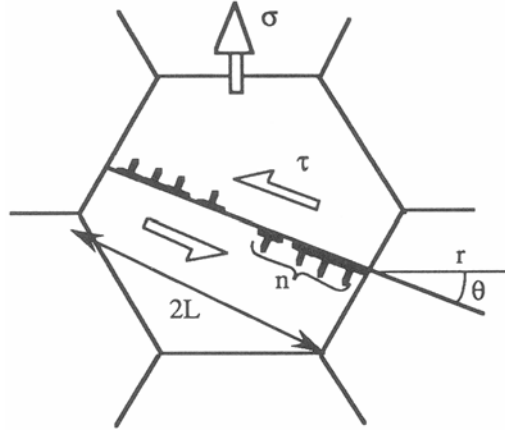
En principe,  $\gamma_p$  devient prépondérant devant  $\gamma_s$ , ce qui signifie que la propagation de la fissure est surtout pilotée par la plasticité [TET63]. Par la suite, cette hypothèse a été reprise par Wallin *et al.* [WAL84].

## VI.A.2 Les mécanismes d'amorçage du clivage : rôle de la déformation plastique locale

Le rôle d'amplification des contraintes, joué par la déformation plastique locale, a souvent été évoqué pour expliquer l'amorçage de défauts de clivage sous des contraintes beaucoup plus faibles que la valeur théorique  $\sigma_c$ . Dans la bibliographie, différents mécanismes, s'appuyant chacun sur des observations expérimentales, ont été proposés pour interpréter l'effet des dislocations sur l'amorçage du clivage.

### a) Le mécanisme de Zener-Stroh

Zener a été le premier à envisager les empilements de dislocations comme amplificateurs de contraintes, ce qui permet d'atteindre localement la contrainte théorique de clivage [ZEN48]. Stroh a explicité ce mécanisme en considérant un empilement de dislocations sur un obstacle (joint de grain ou particule de seconde phase).



**Fig. VI.1** : Mécanisme élémentaire de Stroh & Zener, dans [FPZ93].

En tête d'empilement, le champ de contraintes présente une singularité analogue à celle rencontrée en pointe de fissure (mécanique linéaire élastique de la rupture) :

$$\sigma = (\tau - \tau_i) \sqrt{\frac{L}{r}} f(\theta) \quad (\text{VI.5})$$

$\tau$  désignant la cisssion résolue s'exerçant au point de coordonnées  $(r, \theta)$  en avant de l'empilement,  $\tau_i$  la friction de réseau et  $L$  la longueur de l'empilement. Le clivage prend naissance lorsque  $\sigma$  atteint la contrainte théorique de clivage  $\sigma_c$  sur une longueur suffisante, de l'ordre de  $3b$ . La cisssion critique  $\tau_f$  à rupture s'écrit :

$$\tau_f = \tau_i + \frac{\sigma_c}{f(\theta)} \sqrt{\frac{6b}{L}} \quad (\text{VI.6})$$

En introduisant l'expression de  $\sigma_c$  (équation (VI.1)) dans la relation précédente, et en assimilant  $d_{\{hkl\}}$  à  $b$ , la cisssion à rupture s'écrit sous la forme :

$$\tau_f = \tau_i + \frac{I}{f(\theta)} \sqrt{\frac{6E\gamma_s}{L}} \quad (\text{VI.7})$$

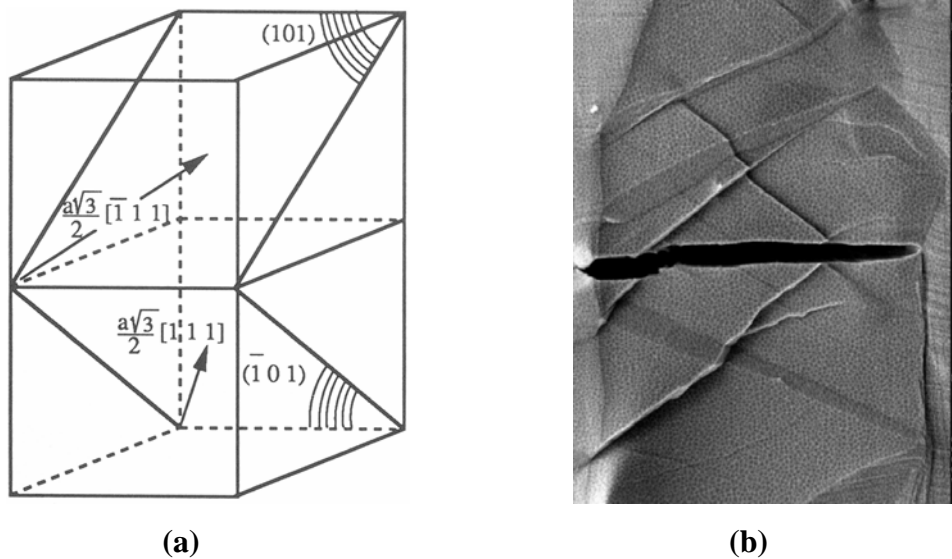
Stroh [STR54] s'est basé sur ce mécanisme élémentaire pour exprimer la condition critique d'amorçage d'une microfissure :

$$nb(\tau - \tau_i) = \gamma_s \quad (\text{VI.8})$$

$n$  désignant le nombre de vecteurs de Burgers constituant l'empilement de longueur  $L$ ,  $\tau_i$  la friction de réseau et  $\gamma_s$  l'énergie de surface. La formule de Griffith (VI.3) permet ensuite de fixer une condition de propagation du défaut.

### b) Le mécanisme de Cottrell

Cottrell [COT58] a proposé un mécanisme de germination des micro-fissures qui est initié par l'interaction entre dislocations. Comme illustré sur la figure (VI.2), deux dislocations glissiles  $\langle 111 \rangle \{110\}$  donnent naissance à une 'superdislocation'  $\{100\}$ , énergétiquement plus stable mais sessile. Le blocage de cette dernière dislocation peut induire un germe de clivage sur le plan  $\{100\}$ .



**Fig. VI.2 :** Représentation du mécanisme de clivage de Cottrell (a) d'après [FPZ93] / amorçage d'une fissure de clivage à l'intersection entre 2 bandes de glissement (b).

Un critère de type propagation est ensuite utilisé pour exprimer la contrainte critique de clivage :

$$\sigma_c = \frac{2\mu \Gamma_s}{d} \quad (\text{VI.9})$$

$d$  est la taille de grains,  $\mu$  le module élastique de cisaillement et  $\Gamma_s$  une énergie de surface effective lors de la propagation :

$$\Gamma_s = \gamma_s + \gamma_p + \gamma_b \quad (\text{VI.10})$$

Cette énergie  $\Gamma_s$  est la somme de 3 composantes : l'énergie de surface  $\gamma_s$ , l'énergie de dissipation plastique au cours de la propagation  $\gamma_p$ , et l'énergie associée au franchissement des barrières microstructurales  $\gamma_b$  (précipités et joints de grains). Dans les aciers austéno-ferritiques, le rôle prépondérant du mécanisme de Cottrell a été mis en évidence par Bugat [BUG00]. La microstructure particulière permet de favoriser la déformation plastique dans la

ferrite et de mettre en évidence l'amorçage du clivage à l'intersection de deux bandes de glissement (figure VI.2.b).

**c) Le rôle du maclage**

Friedel a le premier proposé un mécanisme d'amorçage de la rupture par le maclage, qui par analogie avec un empilement de dislocations, génère une concentration de contraintes locales suffisante pour initier la rupture par clivage [FRI64]. Des sites d'amorçage de rupture brutale ont notamment été observés à l'intersection de macles [CUR80] [CHR95].

Cependant, le maclage et la rupture sont deux phénomènes distincts. D'une part, l'effet dynamique de propagation instable de la fissure se combinant avec celui de la température, le maclage peut tout à fait apparaître après l'amorçage du clivage. D'autre part, ce phénomène, limité aux très basses températures, n'a jamais été considéré comme une cause majeure de l'amorçage de la rupture dans les aciers de cuve.

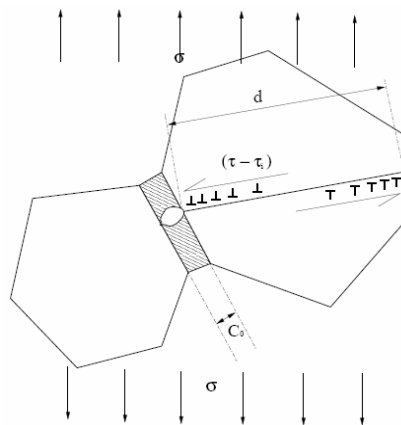
**d) Le mécanisme de Smith**

Smith [SMI66] a proposé un mécanisme de nucléation des défauts de clivage inspiré de celui de Stroh-Zener. Il considère un empilement de dislocations sur une lamelle de cémentite située à un joint de grain selon le schéma de la figure VI.3. La lamelle se rompt sous l'effet de la concentration de contraintes en tête d'empilement, ce qui génère un micro-défaut de clivage de type Griffith.

Smith introduit l'épaisseur  $c_0$  des lamelles de cémentite comme paramètre de son modèle. La condition de rupture des lamelles s'écrit :

$$\left(\frac{c_0}{d}\right)\sigma^2 + (\tau - \tau_i)^2 \left[ 1 + \left(\frac{c_0}{d}\right) \frac{4\tau_i}{\pi(\tau - \tau_i)} \right]^2 \geq \frac{4E\gamma_p}{\pi(1-\nu^2)d} \tag{VI.11}$$

où  $d$  désigne la taille de grain de la matrice ferritique. Dans l'équation (VI.11), le premier terme du membre de gauche traduit l'effet de la contrainte appliquée sur une fissure de longueur  $c_0$ , tandis que le second terme résulte de la concentration de contrainte en tête d'empilement. Le membre de droite traduit quant à lui la résistance de la matrice à la propagation de la fissure de clivage [FPZ93].



**Fig. VI.3 :** Mécanisme de rupture d'un carbure sous l'effet d'un empilement de dislocations

Cette équation illustre l'effet néfaste de l'augmentation de la taille des carbures sur la résistance au clivage. Indépendamment de  $d$ , une augmentation de  $c_0$  entraîne une baisse de la contrainte critique de clivage  $\sigma$ .

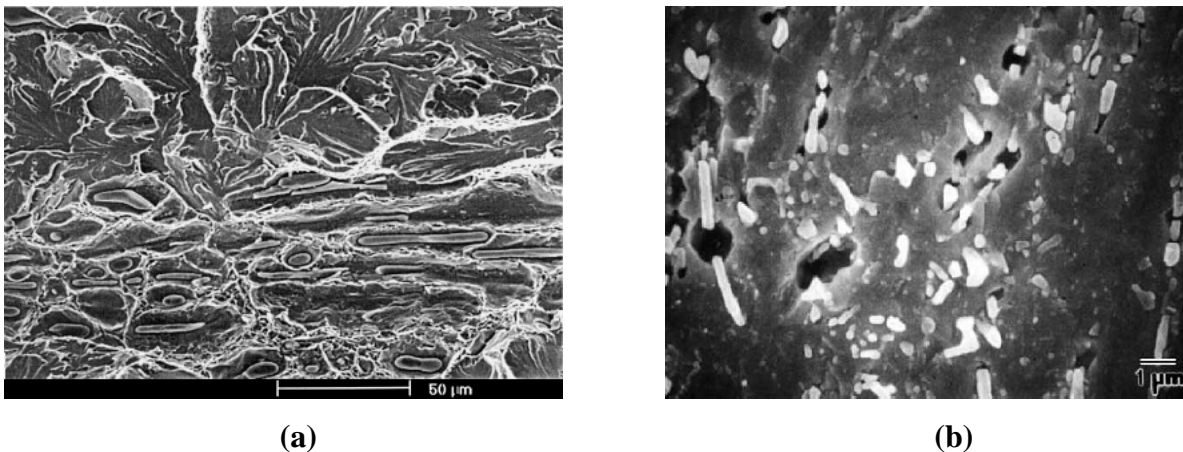
### VI.A.3 Rôle joué par les défauts et la microstructure

Plusieurs revues bibliographiques présentent en détail les principaux résultats expérimentaux relatifs à la rupture par clivage dans les aciers [PES04] [MAT06]. La synthèse qui suit se contente de décrire les entités microstructurales responsables de l'amorçage et de la propagation du clivage.

#### a) Le rôle des particules : sulfures de manganèse (MnS) et carbures (Fe<sub>3</sub>C)

Dans le chapitre précédent, nous avons pu noter que la plupart des mécanismes élémentaires de germination des défauts font intervenir les précipités. Smith a notamment mis en avant le rôle des carbures combiné à celui des empilements de dislocations dans le déclenchement du clivage. Toutefois, dans les aciers de cuve, les carbures ne sont pas les seules particules intervenant dans l'amorçage de la rupture fragile. Ainsi, dans un acier de type 16MND5. Tanguy [TAN01] a mis en évidence la présence de sulfures de manganèse et de carbures sur des éprouvettes Charpy rompues par clivage.

Dans d'autres études réalisées sur une nuance légèrement différente (acier BQ12), les auteurs concluent que les sulfures de manganèse sont à l'origine de la plupart des sites d'amorçage du clivage. Les amas de sulfures de manganèse jouent le rôle d'amplificateurs de contrainte à l'échelle mésoscopique, ce qui favorise le déclenchement du clivage [REN98] [ROS98] [CAR99].



**Fig. VI.4 :** Exemples d'amorçage du clivage sur des carbures (a) d'après Mäntylä et al. [MAN99], et sur des amas de MnS (b) d'après Im *et al.* [IML04].

Dans leurs travaux, Mäntylä *et al.* [MÄN99] insistent sur le rôle joué par les sulfures de manganèse sur la rupture par clivage d'éprouvettes CT et Charpy dans un acier A508. Ils distinguent principalement deux types de sites d'amorçage. A -90°C, de petites inclusions sphériques de MnS ainsi que de grandes inclusions allongées (de l'ordre de 100 µm) sont

responsables des amorces de clivage. A  $-30^{\circ}\text{C}$ , seules les grandes inclusions peuvent induire le clivage (fig. VI.4). Les auteurs soulignent que les sulfures de manganèse jouent un rôle significatif pour 80% des éprouvettes testées. De telles inclusions de  $100\ \mu\text{m}$  n'ont toutefois pas été observées dans l'acier 16MND5 que nous avons étudié.

Plus généralement, le rôle prédominant des sulfures de manganèse n'a pas été mis en évidence pour des nuances d'acier de cuve autres que l'acier BQ12 [PES04]. L'étude fractographique réalisée sur notre matériau n'a pas conclu à une influence prédominante des sulfures de manganèse sur l'amorçage de la rupture brutale à basse température. D'autre part, l'hypothèse selon laquelle les MnS agissent comme des concentrateurs de contrainte a été remise en cause par Hausild [HAU02]. Dans son étude, il considère une cellule élémentaire constituée à partir d'un amas de MnS placé dans une matrice ferritique élastoplastique. Un calcul EF permet de calculer la contrainte moyenne dans la cellule, puis de remonter à la probabilité de rupture de la cellule par le modèle de Beremin. Il conclut que, au sens du modèle de Beremin, la cellule contenant l'amas n'est pas plus critique qu'une cellule ne contenant aucun défaut et que le rôle d'amplificateur de contraintes joué par l'amas n'est pas évident vis-à-vis du critère de Beremin.

Dans les microstructures bainitiques, bon nombre de travaux mettent en avant la rupture des carbures comme événement déclencheur du clivage. On peut par exemple citer les travaux de Hahn [HAH84] et de Im *et al.* [IML04] réalisés sur une microstructure bainitique revenue dont la composition, et notamment la teneur en carbone, est très proche de celle de l'acier A508 C13 que nous avons utilisé. Dans cette microstructure, les auteurs suggèrent que c'est la taille des carbures situés à l'interface entre lattes qui contrôle la rupture par clivage.

### b) Le rôle joué par la microstructure

#### - Effet de la distribution de tailles de défauts :

Nous verrons par la suite que la plupart des modélisations de la rupture fragile par une approche statistique [BER83] s'appuient sur une distribution de tailles de défauts critiques. Le plus souvent, ces distributions sont postulées *a priori* sans être confrontées à des mesures expérimentales de distributions de tailles de carbures ou d'autres précipités.

Dans leur modèle, Wallin *et al.* [WAL84] ont utilisé la distribution proposée par Jayatilaka *et al.* [JAY77] :

$$P(r \geq r_0) = \int_{r=r_0}^{\infty} \frac{c^{a-1}}{(a-2)!} \left(\frac{r_0}{r}\right)^{-a} \exp\left[-\frac{Cr}{r_0}\right] dr \quad (\text{VI.12})$$

$a$  et  $c$  sont des paramètres matériau qui permettent d'ajuster la distribution sur des données expérimentales de tailles de carbures. Pour de grandes tailles de carbures, cette distribution conduit à une forme plus simple en  $r_0^{-a}$ , qui est celle utilisée dans le modèle de Beremin.

Dans le cas particulier des aciers de cuve A508 C13, d'autres études plus récentes ont proposé des fonctions de distribution de tailles de défauts établies à partir des observations expérimentales [LEE02] [ORT05]. La fonction  $P(d > d_0)$  exprime la probabilité que la taille de carbures  $d$  soit supérieure à une valeur  $d_0$  :

$$\text{Ortner } et al. : P(d > d_0) = 1 - \exp \left[ - \left( \frac{d_0}{0.072} \right)^{-2.7} \right] \quad (\text{VI.13})$$

$$\text{Lee } et al. : P(d > d_0) = \exp \left[ - \left( \frac{d_0 - 0.00917}{0.10158} \right)^{1.192} \right] \quad (\text{VI.14})$$

Mathieu [MAT06] remarque que, si les fonctions de distributions proposées par ces deux auteurs ont un aspect globalement similaire, les queues de distributions sont très différentes. Or, ce sont *a priori* les défauts les plus gros qui seront les plus susceptibles d'amorcer le clivage. Ainsi la distribution proposée par Ortner *et al.* conduit à des valeurs de probabilité non nulles pour des tailles de carbures de 3  $\mu\text{m}$ , bien supérieures à celles mesurées expérimentalement. Pour pallier ce défaut, les auteurs ont fixé un seuil de taille critique de défaut  $d_{max}$ . Lors de la mise en forme, tous les carbures de taille supérieure à  $d_{max}$  sont rompus puis émoussés sous l'effet de la déformation plastique, ce qui permet de justifier d'un point de vue théorique la notion de seuil.

- Influence des joints de grains :

Du point de vue de l'amorçage du clivage, la taille de grain intervient sur le comportement local du matériau par l'intermédiaire de l'effet Hall-Petch. La contrainte est d'autant plus élevée que la taille de grain est faible, ce qui favorise l'amorçage du clivage. L'effet des sur-contraintes aux joints de grains a également été mis en avant pour expliquer l'amorçage du clivage sur des carbures situés aux joints [LIN70].

Cependant, la question de l'effet de la taille de grain sur l'amorçage ne dégage pas un consensus évident. Curry et Knott [CUR78] ont suggéré que la taille de grain n'était pas le paramètre microstructural pertinent pour décrire l'amorçage de la rupture par clivage. La taille de grains et la taille des carbures étant souvent conditionnées par les mêmes paramètres d'élaboration, la relation apparente entre la taille de grain et l'amorçage du clivage résulterait d'un biais d'interprétation. A l'opposé, Lin et Evans ont montré qu'en diminuant la taille de grain indépendamment de la taille des carbures, il en résultait une augmentation de la résilience du matériau [LIN87].

- Cas particulier des aciers faiblement alliés : effet des joints inter-paquets de lattes et colonies de carbures :

Dans le cas particulier des aciers faiblement alliés, les joints de grains délimitent les paquets de lattes fortement désorientés et décorés par des amas de carbures. Les travaux de Brozzo *et al.* [BRO78] puis Zhang *et al.* [ZHA99] montrent que ces barrières microstructurales favorisent l'arrêt des fissures de clivage à basse température. Cet effet de la microstructure provient du grand nombre d'interfaces à franchir pour propager la fissure. Ces résultats ont été confirmés expérimentalement sur d'autres aciers faiblement alliés [IML04] [YAN04]. Par ailleurs, Martin-Meizoso *et al.* [MAR94] ont proposé un modèle de double barrière prenant en compte l'arrêt des microfissures de clivage à l'interface carbure-ferrite ou ferrite-ferrite. Ce modèle parvient à décrire l'évolution de la ténacité dans le domaine de la transition ductile / fragile, mais il sous-estime néanmoins la ténacité dans la transition.

Expérimentalement, l'arrêt de fissures sur des joints de paquets de lattes a également été observé par EBSD sur diverses microstructures bainitiques [BOU98]. Les observations EBSD de Nohava *et al.* [NOH03] mettent en évidence l'arrêt de fissures secondaires de clivage sur des colonies de carbures. Les auteurs montrent également que les facettes de clivage coïncident le plus souvent aux paquets de lattes bainitiques. En observant les surfaces de rupture de disques de choc thermique dans un acier 18MND5, Hajjaj [HAJ06] montre que l'entité microstructurale critique vis-à-vis de la propagation et de l'arrêt de fissure correspond au moins à la taille d'un ex-grain austénitique.

Wallin *et al.* [WAL84] suggèrent que le franchissement des barrières microstructurales est essentiellement contrôlé par les carbures. Comme les tailles de carbures et celles des paquets de lattes bainitiques sont liées, ce résultat est tout à fait compatible avec les autres études citées précédemment.

#### **VI.A.4 Rôle joué par les paramètres de chargement**

##### **a) Influence de la température**

La température a de multiples effets sur l'amorçage et la propagation du clivage. La température va influencer sur le comportement plastique, tant à une échelle macroscopique que microscopique.

##### **- Effet de la température sur le comportement plastique :**

A une échelle macroscopique, la démarche consiste généralement à modifier la paramétrisation des lois de comportement pour introduire une dépendance en température des contraintes et de la probabilité de clivage [YAN03] [TAN05]. La dépendance en température de la loi de comportement plastique dans les aciers est complexe car différents phénomènes physiques entrent en jeu. Cette dépendance a déjà été étudiée en détail dans le chapitre IV.

A l'échelle microscopique, on peut citer différents phénomènes expliquant la dépendance du comportement en température, : la friction de réseau, le durcissement des systèmes de glissement  $\{112\}$  par rapport aux systèmes  $\{110\}$ , ou encore la modification des mécanismes de multiplication et d'annihilation des dislocations. A l'heure actuelle, ces mécanismes physiques commencent à être pris en compte dans le cadre de l'étude de la rupture fragile. Dans ses travaux de thèse, Mathieu [MAT06] utilise une modélisation du comportement dérivée de celle du modèle de Cailletaud [CAI87] pour prévoir l'amorçage du clivage dans un agrégat polycristallin de bainite.

La température a également un effet sur les mécanismes locaux d'amorçage et de propagation du clivage : amorçage des défauts sur les carbures, franchissement des barrières microstructurales. Comme le phénomène de propagation du clivage est surtout contrôlé par la propagation des microfissures dans la matrice ferritique, une solution consiste à introduire une dépendance en température de l'énergie de surface [WST84], [MAT06].



- Effet de la température sur l'énergie de surface :

Le terme d'énergie de surface est utilisé de manière assez générique et désigne en fait plusieurs grandeurs liées à des phénomènes distincts :

- l'énergie de cohésion surfacique des atomes  $\gamma_s$  : cette énergie correspond au mécanisme de décohésion des plans atomiques sans déformation plastique ;
- l'énergie équivalente de propagation de fissure dans la ferrite  $\gamma_p^\alpha$  : ce terme fait intervenir à la fois l'énergie de décohésion des atomes ainsi que la contribution des mécanismes de plasticité en pointe de fissure (émission de dislocations) ;
- l'énergie de franchissement des barrières microstructurales  $\gamma_p^{joints}$ . Les barrières sont constituées à la fois par les colonies de carbures, par les joints entre les paquets de lattes et les ex-grains  $\gamma$ .

L'énergie de cohésion  $\gamma_s$  est d'ordinaire prise de l'ordre de  $1 \text{ J m}^{-2}$ . Cet ordre de grandeur a été confirmé par des calculs de dynamique moléculaire qui donnent des valeurs de  $\gamma_s$  d'environ  $2 \text{ J m}^{-2}$  pour le fer- $\alpha$  [BLO04]. Ces valeurs sont supposées indépendantes de la température.

En ce qui concerne l'énergie de propagation,  $\gamma_p^\alpha$  la question de la dépendance en température demeure en suspens. Bon nombre de travaux considèrent que les valeurs de  $\gamma_p^\alpha$  ne sont pas dépendantes de  $T$ .

$T$ (K)	$\gamma_p^\alpha$ (J m <sup>-2</sup> )	Matériau [Référence]
$T < -60^\circ\text{C}$	14	Fer- $\alpha$ [HAH84]
$T = -196^\circ\text{C}$	12,4	Acier 16MND5 [IML04]
$T = -80^\circ\text{C}$	14	Acier A533B [ZHA99]
$T < -60^\circ\text{C}$	7	Acier 16MND5 [ORT05]
$T < -60^\circ\text{C}$	$4.3 < \gamma_p^\alpha < 10$	Acier A533B [BOW84]
$-120^\circ\text{C} < T < -60^\circ\text{C}$	9	Acier 16MND5 [HAU02]

**Tableau VI.1 :** Tableau récapitulatif des valeurs de  $\gamma_p^\alpha$  dans les aciers faiblement alliés

On remarque que Bowen [BOW84] a choisi de faire dépendre le paramètre  $\gamma_p^\alpha$  de la température. Cette dépendance, peut être expliquée par l'émission de dislocations et l'émoussement de la fissure. Wallin *et al.* [WST84] proposent dans leur modèle de décomposer l'énergie de propagation en deux contributions : une contribution athermique  $\gamma_s$  liée à l'énergie de décohésion et une contribution  $w_p$  résultant des mécanismes de plasticité :

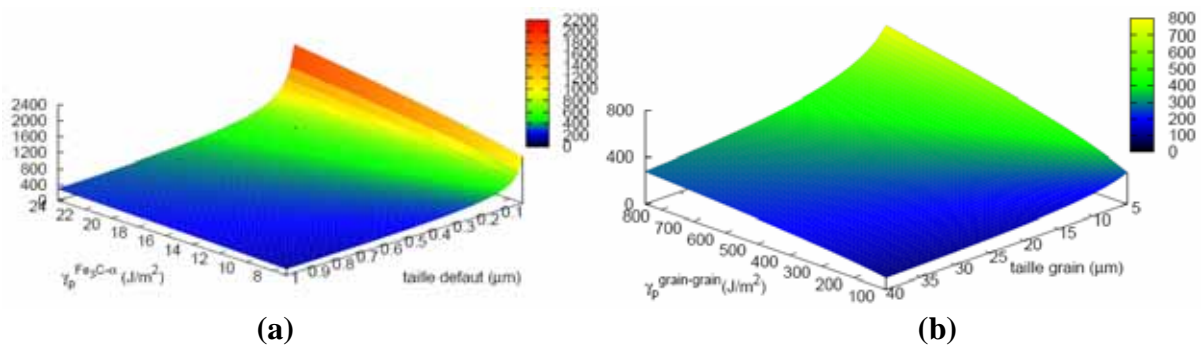
$$\gamma_p^\alpha(T) = \gamma_s + w_p(T) \quad (\text{VI.15})$$

$$w_p(T) = w_0 + (w_p(0) - w_0) \exp(mT) \quad (\text{VI.16})$$

Les auteurs prennent une valeur de  $\gamma_s$  de 2,15, qui est d'ailleurs proche des valeurs obtenues par des simulations atomistiques. Le paramètre  $w_p(0) - w_0$  est fixé à 1,77, tandis que  $m$  vaut 0,0104. Dans le domaine de température compris entre  $-120^\circ\text{C}$  à  $-80^\circ\text{C}$ , les expressions

(VI.15) et (VI.16) conduisent à des valeurs d'énergie  $\gamma_p^\alpha$  proches de celles obtenues par d'autres auteurs. Cette loi d'évolution de l'énergie de propagation a été utilisée avec une paramétrisation légèrement différente par Mathieu [MAT06] : dans le cadre d'une approche locale à l'échelle microscopique, il montre que l'introduction d'une dépendance  $\gamma_p^\alpha(T)$  permet de reproduire l'effet de température identifié expérimentalement dans d'autres travaux.

Concernant le terme d'énergie de franchissement des barrières microstructurales  $\gamma_p^{joints}$ , les différentes données bibliographiques donnent des valeurs de l'ordre de 100 à 120 J m<sup>-2</sup> [HAH84] [ZHA99]. Ces valeurs sont très supérieures à celles de  $\gamma_p^\alpha$ , mais la taille de défaut à prendre en compte n'est pas la taille des carbures, mais celle des paquets de latte bainitiques. Dans ses travaux de thèse, Mathieu a calculé l'ordre de grandeur des contraintes de Griffith relatives à la propagation du clivage dans la ferrite, et au franchissement des barrières. Il a utilisé les données bibliographiques disponibles pour des aciers faiblement alliés proches du 16MND5.



**Fig. VI.5 :** Représentation de la contrainte critique de Griffith dans le cas de la propagation d'un défaut amorcé sur un carbure dans la matrice ferritique (a) et du franchissement des barrières microstructurales (b), d'après [MAT06]

Malgré les fortes valeurs de  $\gamma_p^{joints}$ , la contrainte critique de franchissement des joints de paquets de lattes, calculée au sens de Griffith, est bien inférieure à la contrainte critique d'amorçage du défaut. Pour expliquer ce résultat, les auteurs soulignent que la taille de défaut à considérer est beaucoup plus grande pour l'étape de franchissement des barrières que pour celle de propagation intra-granulaire du clivage. Les auteurs en déduisent que l'étape critique à considérer est l'amorçage du clivage sur un défaut dans la matrice ferritique. Passée cette étape, la contrainte est déjà largement suffisante pour permettre le franchissement des barrières.

### b) Influence de la triaxialité

Dans le cas de la rupture fragile par clivage, le phénomène d'amorçage instable des défauts est souvent considéré comme l'étape critique du processus de rupture. Pour le modèle de Griffith, comme pour les modèles probabilistes que nous verrons par la suite, l'amorçage du clivage est surtout piloté par la plus grande contrainte principale positive.

Des travaux suggèrent néanmoins que la contrainte principale ne suffit pas à formuler un critère d'amorçage ou de propagation du clivage [MA98], [ROO05]. Ces auteurs proposent un critère faisant intervenir et de la nature multiaxiale du chargement, soit en utilisant la pression hydrostatique  $p$ , ou alors un quotient de multiaxialité  $q$  défini à partir des invariants  $J_1$  et  $J_2$  du

tenseur des contraintes [ROO05]. Roos *et al.* introduisent une cisssion critique représentative  $\tau_r$  (*representative shear stress*) :

$$\tau_r = \sqrt{\frac{I}{3}(J_1^2 - 3J_2)} \quad (\text{VI.17})$$

Avec :

$$J_1 = \sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 \quad \text{et} \quad J_2 = \sigma_1\sigma_2 + \sigma_2\sigma_3 + \sigma_1\sigma_3 \quad (\text{VI.18})$$

Le quotient de multiaxialité est alors défini par le rapport :

$$q = \frac{\tau_r}{\sigma_m} \quad (\text{VI.19})$$

Le critère stipule que le quotient  $q$  doit atteindre une valeur critique sur une certaine distance pour déclencher la rupture par clivage. La validité de l'approche de Roos *et al.* est vérifiée expérimentalement pour diverses géométries d'éprouvettes (CT, flexion trois points, éprouvettes plates entaillées).

À une échelle plus locale, d'autres auteurs se sont penchés sur le rôle de la triaxialité dans la rupture par clivage. Ainsi, à partir de calculs EF, Kroon *et al.* ont montré que les carbures de forme oblongue sont les plus critiques vis-à-vis de l'amorçage du clivage, mais que leur nocivité relative est atténuée lorsque l'on augmente le taux de triaxialité [KRO05]. De ce point de vue, l'effet de la triaxialité sur l'amorçage du clivage sur des carbures serait donc bénéfique.

En ce qui concerne la propagation, la plupart des critères classiques font intervenir la plus grande contrainte principale d'ouverture et l'augmentation de la triaxialité doit naturellement conduire à favoriser la propagation du clivage. Cette tendance est confirmée par des simulations atomistiques de l'effet de la triaxialité sur l'émission de dislocations en pointe de fissure dans le fer- $\alpha$  [BEL04].

Le couplage d'une modélisation micromécanique avec une approche locale de la rupture a également permis d'apporter des éléments importants sur l'effet du taux de triaxialité sur la rupture [MAT06]. Les auteurs suggèrent un effet combiné de diminution des dispersions de probabilité de rupture et augmentation de la contrainte moyenne de rupture lorsque la triaxialité augmente. Ce dernier résultat peut sembler surprenant, mais les auteurs montrent que si on ne considère que les queues de distributions de probabilités de rupture, la tendance peut être modulée voire inversée en jouant sur les valeurs de température ou d'énergie de surface effective.

Enfin, la modélisation des hétérogénéités locales de contraintes principales, abordée dans le chapitre V, montre que ces dernières sont fortement influencées par le niveau de triaxialité moyen dans le volume élémentaire. Négligeons l'effet de  $\chi$  sur la nucléation des défauts de clivage. Du point de vue du comportement, le taux de triaxialité  $\chi$  peut avoir un effet tout autant bénéfique ou néfaste sur la rupture :

- A contrainte principale imposée, l'augmentation de  $\chi$  tend à diminuer les hétérogénéités et donc à réduire le nombre de zones fortement chargées dans l'agrégat.
- A déformation imposée, un niveau de triaxialité élevé va fatalement correspondre à un niveau de contraintes élevé et l'augmentation de  $\chi$  va faciliter la propagation du clivage.

## VI.B Les théories d'approche locale de la rupture

Les valeurs expérimentales de résilience et de ténacité montrent une grande dispersion des propriétés de rupture fragile des aciers faiblement alliés. C'est ainsi que la plupart des approches locales de la rupture se fondent sur deux hypothèses assez générales :

- Ces modèles utilisent une grandeur caractéristique locale, ce qui permet d'introduire une composante probabiliste. A l'échelle locale, il faut atteindre une contrainte critique dans un volume de taille caractéristique, ou volume élémentaire, pour déclencher le clivage : c'est ainsi que l'on parle d'approche locale de la rupture.
- Ces approches exploitent également l'hypothèse du maillon le plus faible introduite par Weibull : il y a rupture catastrophique dès lors que le critère de clivage est atteint dans un volume élémentaire (ou maillon). C'est cette hypothèse qui permet de relier la probabilité de rupture d'un volume élémentaire à celle de l'éprouvette.

### VI.B.1 La modélisation RKR

Ritchie, Knott et Rice [RKR73] ont proposé une première modélisation de la rupture par clivage en introduisant la notion de distance critique pour amorcer la rupture instable. Il y a rupture si la contrainte locale d'ouverture en pointe de fissure atteint une valeur critique  $\sigma_c$  sur une distance critique  $X_c$ , qui constitue une grandeur caractéristique du matériau étudié.

Ce modèle utilise une expression du champ de contraintes en pointe de fissure établie à partir de la solution calculée par éléments finis par Hutchinson, Rice et Rosengren (champ H.R.R.) [HUT68] :

$$\frac{\sigma_{ij}}{\sigma_y} = g_{ij}(\theta) f \left[ \frac{r}{(K/\sigma_y)^2} \right] \quad (\text{VI.20})$$

$\sigma_{ij}$  désigne la composante  $(i,j)$  du tenseur local des contraintes,  $\sigma_y$  correspond à la limite d'élasticité,  $r$  est la distance à la pointe de fissures en coordonnées polaires, tandis que  $g_{ij}(\theta)$  et  $f$  sont des fonctions dépendant du matériau et de son niveau d'écroutissage.  $K$  désigne le facteur d'intensité des contraintes.

Les auteurs montrent qu'en reliant  $X_c$  à la taille de grains de l'acier, la contrainte de clivage devient dépendante de la microstructure. De plus, ils expliquent la nécessité d'introduire une distance critique de par la nature probabiliste de la rupture par clivage : en pointe de fissure, le volume chargé au delà de  $\sigma_c$  doit être suffisamment grand pour contenir un défaut critique.

## VI.B.2 La théorie du maillon le plus faible

Dans les aciers faiblement alliés, la rupture par clivage génère une forte dispersion des mesures de résilience et de ténacité. C'est ainsi que la plupart des modèles d'approche locale de la rupture se basent sur des considérations d'ordre probabiliste.

Ces modèles sont fondés sur une hypothèse simple : la rupture d'un volume élémentaire d'une pièce macroscopique conduit à la rupture catastrophique de toute la structure. On parle de théorie du maillon le plus faible : la résistance de la 'chaîne' (la structure) est déterminée par celle du maillon le moins résistant. Cette théorie s'applique bien aux matériaux purement fragiles, tels que les céramiques. Elle permet notamment d'expliquer le fait que la ténacité est d'autant plus faible que l'échantillon est de grande taille.

Cette théorie repose sur deux hypothèses quant au mécanisme de rupture mis en jeu :

- La rupture est de nature fragile et brutale, ce qui est le cas de la rupture par clivage dans les aciers faiblement alliés.
- Chaque maillon élémentaire de la chaîne est indépendant des autres maillons : cela implique que, si une fissure de clivage s'amorce dans un volume élémentaire, elle n'aura pas d'influence sur les autres volumes élémentaires environnants. Il s'agit d'une hypothèse simpliste, car, en réalité, la fissuration locale s'accompagne d'une décharge et les contraintes vont alors se reporter sur des zones adjacentes.

Dans le cadre de la théorie du maillon le plus faible, la structure (par exemple une éprouvette CT) est divisée en  $N$  maillons élémentaires de volume  $V_0$  soumis à une contrainte principale maximale  $\sigma_i$  homogène. La probabilité de rupture cumulée d'un volume élémentaire soumis à la contrainte  $\sigma_i$  est notée  $P_{R0}(\sigma_i)$ . La probabilité de survie  $P_{NR0}$  du maillon ( $i$ ) vaut par conséquent :

$$P_{NR0}(\sigma_i) = 1 - P_{R0}(\sigma_i) \quad (\text{VI.21})$$

La probabilité de survie de la structure  $P_{NR}(\sigma)$  est quant à elle égale au produit des probabilités de survie de chaque maillon ( $i$ ) :

$$P_{NR}(\sigma) = \prod_{i=1}^n (1 - P_{R0}(\sigma_i)) \quad (\text{VI.22})$$

De l'équation (VI.22), on déduit que :

$$\ln(P_{NR}(\sigma)) = \sum_{i=1}^n \ln(1 - P_{R0}(\sigma_i)) \quad (\text{VI.23})$$

Il est ainsi possible d'exprimer la probabilité de survie du volume élémentaire en fonction de  $P_{R0}(\sigma_i)$

$$P_{NR}(\sigma) = \exp\left(-\sum_{i=1}^n \ln\left(\frac{1}{1 - P_{R0}(\sigma_i)}\right)\right) \quad (\text{VI.24})$$

Soit la fonction  $f(\sigma_i)$  définie par :

$$f(\sigma_i) = \ln \left( \frac{1}{1 - P_{R0}(\sigma_i)} \right) \quad (\text{VI.25})$$

La probabilité de rupture du volume  $V$  devient :

$$P_R(\sigma) = 1 - \exp \left( - \sum_{i=1}^n f(\sigma_i) \right) \quad (\text{VI.26})$$

Weibull [WEI51] a proposé une forme empirique pour la fonction  $f(\sigma)$  :

$$f(\sigma_i) = \left( \frac{\langle \sigma_i - \sigma_0 \rangle}{\sigma_u} \right)^m \quad (\text{VI.27})$$

Où la fonction  $\langle \sigma_i - \sigma_0 \rangle$  désigne la plus grande contrainte principale positive.  $\sigma_0$  est une contrainte seuil liée aux barrières microstructurales faisant obstacle au clivage.  $\sigma_u$  est une contrainte de normalisation, tandis que le module de Weibull  $m$  est relié à la dispersion des contraintes à rupture.

Pour la probabilité de rupture du maillon ( $i$ ), la fonction proposée par Weibull conduit à la forme suivante:

$$P_{R0}(\sigma) = 1 - \exp \left[ - \left( \frac{\langle \sigma_i - \sigma_0 \rangle}{\sigma_u} \right)^m \right] \quad (\text{VI.28})$$

La probabilité de rupture du volume  $V$  peut quant à elle s'écrire :

$$P_R(\sigma) = 1 - \exp \left[ - \int_V \left( \frac{\langle \sigma_i - \sigma_0 \rangle}{\sigma_u} \right)^m \frac{dV}{V_0} \right] \quad (\text{VI.29})$$

### VI.B.3 Modèle de Beremin et modèles dérivés

#### a) Le modèle de Beremin

Ce modèle a été développé par le groupe de travail Beremin [BER83]. Il constitue toujours l'un des modèles statistiques les plus utilisés pour décrire la rupture brutale par clivage dans les aciers faiblement alliés. Le modèle de Beremin s'appuie sur la théorie du maillon le plus faible. La propagation instable d'un micro-défaut suivant le critère de Griffith constitue l'évènement critique qui conduit à la rupture du volume élémentaire  $V_0$  et du volume  $V$ . Deux hypothèses supplémentaires sont propres au modèle de Beremin :

- D'une part, les mécanismes de plasticité génèrent instantanément une population de micro-défauts initiale que l'on supposera par la suite figée quel que soit le niveau de

déformation. Cette hypothèse simplificatrice implique notamment que le calcul de la probabilité de rupture s'applique uniquement au volume déformé plastiquement, noté  $V_p$ .

- D'autre part, selon la théorie de Weibull, le critère de stabilité des micro-défauts est exprimé en fonction de la plus grande contrainte principale  $\sigma_I$ , ce qui signifie que l'on ne prend pas en compte l'orientation des plans de clivage et des défauts par rapport à la direction de sollicitation.

Dans le modèle de Beremin, la contrainte critique de clivage est reliée à la taille de micro-défauts  $r_c$  par la relation de Griffith, que l'on peut ré-écrire sous une forme simplifiée :

$$\sigma_c = \sqrt{\frac{C}{r_c}} \quad \text{avec} \quad C = \frac{\pi E \gamma_{eff}}{2(1-\nu^2)} \quad (\text{VI.30})$$

Le modèle de Beremin utilise la distribution de tailles de carbures de Jayatilaka [JAY77], ce qui permet d'introduire une description probabiliste de la rupture (cf. équation (VI.17)). Si on suppose que seuls les défauts les plus gros sont susceptibles d'amorcer la rupture par clivage, la fonction densité de tailles de carbures  $f(r)$  se simplifie sous la forme :

$$f(r) = \frac{\alpha}{r^\beta} \quad (\text{VI.31})$$

Il y a rupture si la taille de micro-défaut est supérieure à  $r_c$ . L'expression (VI.31) permet de déduire l'expression de  $P(r > r_c)$  :

$$P(r \geq r_c) = \int_{r_c}^{\infty} f(r) dr = \int_{r_c}^{\infty} \frac{\alpha}{r^\beta} dr \quad (\text{VI.32})$$

Ce qui conduit à l'expression suivante :

$$P(r \geq r_c) = \left[ -\frac{\alpha}{(\beta-1)r^{\beta-1}} \right]_{r_c}^{\infty} = \frac{\alpha}{(\beta-1)r_c^{\beta-1}} \quad (\text{VI.33})$$

Comme  $r_c$  et  $\sigma_c$  sont liés par la relation de Griffith, la probabilité de rupture du volume élémentaire peut s'écrire :

$$P(\sigma \geq \sigma_c) = P(r \geq r_c(\sigma_c)) = \left( \frac{\sigma_c}{C^{1/2} ((\beta-1)/\alpha)^{1/(2\beta-2)}} \right)^{2\beta-2} \quad (\text{VI.34})$$

En notant  $m$  et  $\sigma_u$  les paramètres suivants :

$$m = 2\beta - 2 \quad \text{et} \quad \sigma_u = C^{1/2} ((\beta-1)/\alpha)^{1/(2\beta-2)} \quad (\text{VI.35})$$

La probabilité de rupture dans le volume  $V_0$  s'écrit donc sous la forme d'une fonction de Weibull à deux paramètres :

$$P_{R0}(\sigma_c) = P(r \geq r_c(\sigma_c)) = \left( \frac{\sigma_c}{\sigma_u} \right)^m \quad (\text{VI.36})$$

Si on considère que la structure est constituée d'un grand nombre de volumes élémentaires, la probabilité de rupture d'un maillon  $P_{R0}(\sigma_i)$  doit nécessairement être faible devant la probabilité de rupture du volume  $P_R(\sigma)$ . La théorie du maillon le plus faible est appliquée en réalisant un développement limité de l'expression (VI.23) à l'ordre 1 :

$$\ln(P_{NR}(\sigma)) = \sum_{i=1}^n \ln(1 - P_{R0}(\sigma_i)) = - \sum_{i=1}^n P_{R0}(\sigma_i) \quad (\text{VI.37})$$

En supposant que le champ de contrainte est homogène ( $\sigma_i = \Sigma_I$ ) dans le volume  $V$ , il vient :

$$P_R(\Sigma_I) = 1 - \exp \left[ - \frac{V}{V_0} P_{R0}(\Sigma_I) \right] \quad (\text{VI.38})$$

Toujours dans le cas d'un champ homogène de contrainte principale maximale  $\Sigma_I$ , on introduit la contrainte de Weibull notée  $\sigma_w$  :

$$\sigma_w = \Sigma_I \left( \frac{V}{V_0} \right)^m \quad (\text{VI.39})$$

Ce qui permet d'obtenir l'expression finale de la probabilité de rupture  $P_R(\Sigma_I)$  dans le volume  $V$  :

$$P_R(\Sigma_I) = 1 - \exp \left[ - \left( \frac{\sigma_w}{\sigma_u} \right)^m \right] \quad (\text{VI.40})$$

L'expression de la probabilité de rupture  $P_R(\Sigma_I)$  dans le volume  $V$  est de type Weibull, analogue à celle proposée dans l'équation (VI.29), mais sous une forme simplifiée à deux paramètres :  $m$  et  $V_0 \sigma_u^m$ . L'exposant de Weibull  $m$  permet de rendre compte de la dispersion des tailles de défauts, tandis que  $\sigma_u$  définit la contrainte  $\sigma_I$  pour laquelle la probabilité de rupture du maillon est de 63%.

Quant au volume  $V_0$ , il s'agit du volume élémentaire représentatif vis-à-vis de la distribution de micro-défauts. Ce paramètre doit vérifier deux conditions :

- $V_0$  doit être assez petit pour que la contrainte  $\sigma_I$  puisse être considérée comme homogène dans chaque maillon ;
- $V_0$  doit également être suffisamment grand pour contenir une distribution de défauts représentative de la réalité ; d'une manière générale, Beremin [BER83] considère que le volume  $V_0$  doit contenir quelques ex-grains austénitiques.



Pour un acier de cuve A508 C13, et en se basant sur cette hypothèse, on trouve des valeurs de  $V_0$  comprises entre  $(50 \mu\text{m})^3$  [BER83], [REN98] [ROS98] et  $(100 \mu\text{m})^3$  [RKR73] [HAU02].

En pratique, afin de prendre en compte les gradients de contrainte dans le volume  $V$ , une formulation générale de  $\sigma_w$  est proposée :

$$\sigma_w = \left[ \frac{I}{V_0} \int_{V_p} (\sigma_I)^m dV \right]^{1/m} \quad (\text{VI.41})$$

où  $\sigma_I$  désigne la plus grande contrainte principale locale dans le volume  $dV$ . On remarque que l'intégrale porte sur le volume plastifié  $V_p$ , ce qui revient à supposer que tous les micro-défauts sont activés par la déformation plastique.

### b) Prise en compte de l'effet de la déformation plastique dans le modèle de Beremin

Les travaux de Beremin ont montré qu'une pré-déformation plastique à température ambiante a pour effet de retarder l'apparition du clivage. Ils ont également mis en évidence le caractère anisotrope de la rupture d'échantillons pré-déformés en compression.

Pour expliquer cet effet bénéfique de la déformation vis-à-vis de la rupture fragile, deux explications sont avancées :

- D'une part, la déformation plastique entraîne un émoussement des micro-défauts déjà présents dans le matériau, ce qui tend à réduire progressivement leur nocivité.
- D'autre part, les grandes déformation plastiques peuvent induire une fragmentation des grains initiaux en sous grains, et par conséquent une augmentation de la ténacité des échantillons.

Pour tenir compte de ces différents effets, la contrainte de Weibull a été modifiée par l'ajout d'un terme exponentiel qui est fonction de la déformation plastique principale  $\varepsilon_I^p$  ; plus la déformation est élevée, et plus la contrainte de Weibull est faible, ce qui réduit d'autant la probabilité de rupture dans le volume  $V$  :

$$\sigma_w = \left[ \frac{I}{V_0} \int_{V_p} (\sigma_I)^m \exp\left(-\frac{m \varepsilon_I^p}{k}\right) dV \right]^{1/m} \quad (\text{VI.42})$$

Si l'on admet que la déformation plastique entraîne un émoussement des micro-défauts, alors la rupture brutale ne peut s'initier qu'à partir des micro-défauts qui viennent juste d'apparaître. Cela suppose que la nucléation des micro-défauts n'est pas instantanée comme postulé dans le modèle de Beremin, mais qu'elle s'effectue de manière continue au cours de la déformation. Dès lors, il faut se donner une loi régissant la nucléation des micro-défauts dans le matériau.

**c) Le modèle de Bordet**

Bordet *et al.* [BOR05\_I] s'appuient sur la notion de prise en compte de la déformation plastique proposée plus haut pour formuler une nouvelle approche. Leur approche conserve la plupart des principes du modèle de Beremin, mais elle remet en cause l'hypothèse selon laquelle la population de micro-défauts est figée dès l'apparition de la plasticité : dans le modèle de Bordet, ceux-ci sont nucléés progressivement au cours de la déformation. Lorsqu'un micro-défaut est nucléé, les auteurs envisagent deux cas de figure :

- Soit la rupture du précipité entraîne instantanément la propagation du clivage dans la matrice.
- Soit la rupture du précipité n'engendre pas instantanément la rupture par clivage, auquel cas le micro-défaut s'érousse sous l'effet de la déformation et perd son caractère nocif.

Les événements de nucléation des défauts et d'amorçage du clivage sont donc ici considérés comme simultanés. Pour un incrément de déformation infinitésimal  $d\varepsilon_p$ , la probabilité de rupture dans le volume élémentaire peut ainsi être exprimée de la manière suivante :

$$P_{cleav}(\sigma_l, d\varepsilon_p) = P_{nucl}(d\varepsilon_p) P_{propag}(\sigma_l) \quad (VI.43)$$

Où  $P_{nucl}(d\varepsilon_p)$  désigne la probabilité de nucléation d'un micro-défaut lors d'un incrément de déformation  $d\varepsilon_p$  et  $P_{propag}(\sigma_l)$  la probabilité de propagation du défaut suivant un critère de type Griffith. Le terme  $P_{nucl}(d\varepsilon_p)$  est considéré comme proportionnel au nombre de sites non nucléés et donc potentiellement nocifs pour le clivage. Cette hypothèse conduit à une relation du type :

$$P_{nucl}(d\varepsilon_p) \propto \frac{\sigma_{ys}(T, \dot{\varepsilon}_p)}{\sigma_{ys,0}} \exp\left[-\frac{\sigma_{ys}(T, \dot{\varepsilon}_p)}{\sigma_{ys,0}} \frac{\varepsilon_p}{\varepsilon_{p,0}}\right] d\varepsilon_p \quad (VI.44)$$

Le terme  $P_{propag}(\sigma_l)$  est calculé classiquement à partir de la fonction de densité de distributions de tailles de défauts critiques postulée dans le modèle de Beremin. Toutefois, les auteurs font l'hypothèse d'une contrainte seuil  $\sigma_{th}$  en dessous de laquelle il ne peut pas y avoir propagation instable. Cela implique l'existence d'une taille de défaut maximale au-delà de laquelle le terme  $P_{propag}(\sigma_l)$  est nul :

$$P_{propag}(\sigma_l) = \int_{r_c(\sigma_l)}^{r_c(\sigma_{th})} f(r) dr \quad \text{avec} \quad f(r) = \frac{\alpha}{r^\beta} \quad (VI.45)$$

Cette représentation conduit à la relation suivante :

$$P_{propag}(\sigma_l) = \left(\frac{\sigma_l}{\sigma_u}\right)^m - \left(\frac{\sigma_{th}}{\sigma_u}\right)^m \quad \text{si} \quad \sigma_l \geq \sigma_{th} \quad (VI.46)$$

$$P_{propag}(\sigma_l) = 0 \quad \text{sinon} \quad (VI.47)$$

La probabilité de rupture du volume élémentaire  $P_{R0}(\sigma_l, \varepsilon_{p,u})$ , c'est-à-dire la probabilité de nucléation puis de propagation d'un défaut entre l'état non déformé  $\varepsilon_p = 0$  et l'état déformé  $\varepsilon_p = \varepsilon_{p,u}$  s'écrit :

$$P_{R0}(\sigma_l, \varepsilon_{p,u}) = \frac{1}{\kappa} \int_0^{\varepsilon_{p,u}} P_{nucl}(d\varepsilon_p) P_{propag}(\sigma_l) d\varepsilon_p \quad (VI.48)$$

Le coefficient  $\kappa$  traduit la fonction de proportionnalité exprimée dans l'équation (VI.44). La probabilité de rupture du volume plastifié  $V_p$ , dérivée de l'approche de Beremin s'exprime sous la forme :

$$P_R = 1 - \exp \left[ \left( \frac{\sigma_w^*}{\sigma_u^*} \right)^m \right] \quad (VI.49)$$

L'expression de la contrainte de Weibull  $\sigma_w^*$  s'écrit ici sous la forme :

$$\sigma_w^* = \left[ \int_{V_p} \int_0^{\varepsilon_{p,u}} \frac{\sigma_{ys}(T, \dot{\varepsilon}_p)}{\sigma_{ys,0}} \exp \left( - \frac{\sigma_{ys}(T, \dot{\varepsilon}_p)}{\sigma_{ys,0}} \frac{\varepsilon_p}{\varepsilon_{p,0}} \right) (\sigma_l^m - \sigma_{th}^m) d\varepsilon_p \frac{dV}{V_0} \right]^{1/m} \quad (VI.50)$$

La contrainte de normalisation  $\sigma_u^*$  est également affectée par le coefficient  $\kappa$  :

$$\sigma_u^* = \kappa^{1/m} \sigma_u \quad (VI.51)$$

Si le rapport  $\sigma_{ys,0} \varepsilon_{p,0} / \sigma_{ys}$  est grand devant les valeurs de déformation plastique  $\varepsilon_p$  à rupture, ou autrement dit si la proportion de défauts nucléés reste faible devant la population totale de précipités, alors l'expression de  $\sigma_w^*$  peut être simplifiée :

$$\sigma_w^* = \left[ \int_{V_p} \int_0^{\varepsilon_{p,u}} \frac{\sigma_{ys}(T, \dot{\varepsilon}_p)}{\sigma_{ys,0}} (\sigma_l^m - \sigma_{th}^m) d\varepsilon_p \frac{dV}{V_0} \right]^{1/m} \quad (VI.52)$$

Ce modèle a été utilisé pour décrire la rupture par clivage dans un acier 450 EMZ : le modèle reproduit correctement les effets de taille, de contrainte et de température et de vitesse de déformation sur la rupture. Cette description permet également de s'affranchir de plusieurs difficultés rencontrées avec le modèle de Beremin : Bordet *et al.* [BOR05\_II] montrent que le paramètre  $m$  ne dépend plus de la géométrie des éprouvettes, de la vitesse de sollicitation ou de la température : ces dépendances sont prises en compte explicitement dans le calcul de  $\sigma_w^*$ . L'utilisation de ce modèle permet notamment d'améliorer la calibration du paramètre  $m$ .

#### d) Le modèle WST

Le modèle WST (Wallin, Saario, Törrönen [WST84]) repose sur des hypothèses proches de celles du modèle de Beremin. Toutefois, les auteurs considèrent que les micro-défauts qui

gouvernement le clivage sont exclusivement constitués par les carbures. Ce modèle utilise également une approche probabiliste de type maillon le plus faible pour décrire la rupture à d'un élément de volume à partir du critère de Griffith modifié par Curry et Knott [CUR78]. Ce critère donne l'expression de la contrainte critique de clivage  $\sigma_c$  :

$$\sigma_c = \sqrt{\frac{\pi E(\gamma_s + w_p(T))}{2(1-\nu^2)r_0}} \quad (\text{VI.53})$$

$E$  et  $\nu$  désignent les constantes élastiques du matériau,  $r_0$  la taille de défaut critique conduisant à la rupture macroscopique, tandis que  $\gamma_s$  est l'énergie de surface du matériau et  $w_p(T)$  l'énergie dissipée plastiquement lors de la création d'une surface unité.

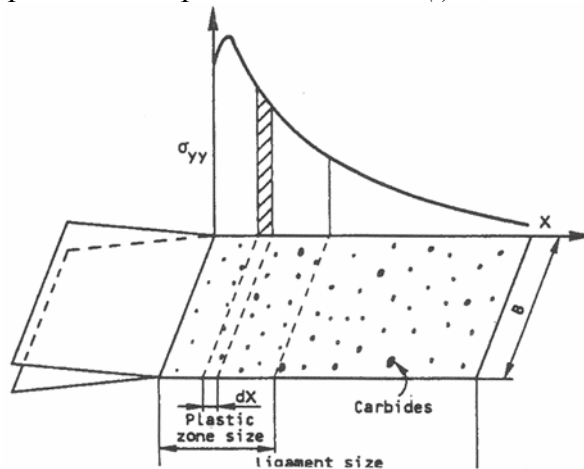
L'introduction d'une dépendance de  $w_p$  en température marque une différence par rapport au modèle de Beremin dans lequel la contrainte  $\sigma_c$  est supposée comme indépendante de  $T$ . Ce choix s'appuie sur le rôle joué par les mécanismes activés thermiquement : ils rendent la déformation plastique d'autant plus difficile que  $T$  diminue, ce qui correspond à une diminution de  $w_p(T)$  :

$$w_p(T) = w_0 + (w_p(0) - w_0) \exp(mT) \quad (\text{VI.54})$$

$w_p(0)$  définit la valeur de  $w_p$  à  $T = 0$  K, et  $w_0$  et  $m$  désignent deux constantes. A noter que la dépendance en température de  $\sigma_c$  est du même ordre que celle de la limite d'élasticité. Soit un élément de volume  $V_0$  contenant  $N$  carbures. La probabilité de survie de ce volume s'écrit :

$$P_{NR}(V_0) = \prod_{i=1}^N (1 - P_i(r > r_0)) \quad (\text{VI.55})$$

Où  $P_i(r > r_0)$  désigne la probabilité rupture d'un carbure ( $i$ ).



**Fig. VI.6** : Hypothèses du modèle WST [WST84]

Considérons maintenant une fissure plane macroscopique (figure VI.6), soient :

- $B$  la largeur de la fissure
- $dx$  la distance élémentaire considérée en avant de la pointe de fissure
- $N_a$  la densité surfacique moyenne de carbures dans le plan en avant de la fissure
- $f$  la fraction de carbures ayant généré des micro défauts.

La probabilité de rupture calculée sur le volume plastique devient :

$$P_r(V_p) = 1 - \prod_{x=0}^{R_p} (1 - P(r > r_0))^{f N_a B dx} \quad (\text{VI.56})$$

$R_p$  définit la taille de zone plastique : l'amorçage du clivage ne concerne que les défauts situés dans cette zone. D'après l'équation (VI.34), la taille de défaut critique  $r_0$  dépend de  $\sigma_c$ , qui est une fonction de  $K_I$ . Par conséquent la probabilité de rupture est également une fonction du facteur d'intensité des contraintes  $K_I$  :

$$P_r(K_I, V_p) = 1 - \prod_{x=0}^{R_p} (1 - P(r > r_0(K_I)))^{f N_a B dx} \quad (\text{VI.57})$$

Cette dernière probabilité correspond à la probabilité pour que la ténacité  $K_{IC}$  prenne la valeur  $K_I$ . On peut donc calculer l'espérance de la ténacité  $K_{IC}$  qui est définie comme étant la moyenne du facteur d'intensité  $K_{I,i}$  sur chacun des sites  $i$  critiques d'amorçage:

$$E(K_{IC}) = \sum_{i=0}^{\infty} K_{I,i} [P_r(r \geq r_0(K_{I,i})) - P_r(r \geq r_0(K_{I,i-1}))] \quad (\text{VI.58})$$

Cette valeur peut ensuite être comparée aux résultats expérimentaux de manière à caler les paramètres  $w_p(0)$ ,  $w_0$  et  $m$ . Pour cela, il faut se fixer une distribution en taille de carbures. Dans le cas du modèle WST, il s'agit de la distribution de Jayatilaka *et al.* ajustée sur des mesures expérimentales de distribution de taille de carbures et de la forme :

$$P(r \geq r_0) = \int_{r=r_0}^{\infty} \frac{c^{a-1}}{(a-2)!} \left(\frac{r_0}{r}\right)^{-a} \exp\left[-\frac{Cr}{r_0}\right] dr \quad (\text{VI.59})$$

Comme expliqué précédemment, cette distribution, pour de grandes tailles de carbures, conduit à une forme plus simple en  $r^{-a}$ , qui est celle utilisée dans le modèle de Beremin.

Il est intéressant de signaler que le recalage sur les valeurs expérimentales des paramètres régissant l'évolution de  $w_p(T)$  (équation (VI.35)) conduit, pour deux aciers de cuves, à deux distributions différentes de  $K_{IC}$ . Il n'y a donc pas d'universalité de la dépendance de la ténacité avec la température dans ce modèle.

D'autres modèles d'approche locale, basés sur le principe du maillon le plus faible, ont été proposés dans la littérature par Margolin *et al.* [MAR98], Kroon *et al.* [KRO05], et Ortner *et al.*, [ORT96]. Ils sont détaillés dans l'**annexe F.1**.

## VI.C Formulation d'un modèle d'approche locale de la rupture par clivage basé uniquement sur les hétérogénéités de $\sigma_I$ dans la microstructure

### VI.C.1 Présentation du modèle

Dans un premier temps, nous proposons un critère basé uniquement sur les hétérogénéités de contraintes dans la microstructure : l'objectif est de déterminer si ces hétérogénéités peuvent expliquer à elles seules la dispersion des contraintes à rupture.

Dans le critère de Griffith, à chaque défaut de taille  $r_c$  est associé une contrainte critique  $\sigma_c$ . Dans l'approche locale classique de la rupture, la dispersion des tailles de défauts va se traduire par une dispersion de contraintes critiques à rupture, ce qui engendre une dispersion de probabilités d'amorçage de la rupture fragile.

Supposons maintenant que la distribution de tailles de carbures soit homogène : tous les défauts sont de taille  $r_{cmoy}$ . Par la relation de Griffith, il est alors possible de calculer une contrainte critique moyenne  $\sigma_{cmoy}$  associée à cette distribution homogène :

$$\sigma_{cmoy} = \sqrt{\frac{\pi E \gamma_s}{2(1-\nu^2)r_{cmoy}}} \quad (VI.60)$$

Afin de calculer  $r_{cmoy}$ , on utilise la fonction de distribution de tailles de défauts proposée par Lee et al [LEE02] :

$$P(r > r_c) = \exp\left[-\left(\frac{2r_c - a}{b}\right)^m\right] \quad (VI.61)$$

Lee *et al.* ont identifié les paramètres  $a$ ,  $b$  et  $m$  ont été identifiés pour un acier de cuve bainitique A508 C13 à partir des observations microstructurales :  $a = 0,00917$ ,  $b = 0,10158$ ,  $m = 1,192$ . La probabilité  $P(r > r_c)$  qu'un carbure soit de taille supérieure à  $r_c$  est tracée sur la figure VI.7.

Il faut souligner que, si la distribution de Lee *et al.* est identifiée pour une nuance d'acier de cuve proche de notre matériau, la distribution des tailles de carbures peut néanmoins présenter quelques différences. Dans une microstructure bainitique revenue, on peut notamment s'attendre à trouver des carbures plus gros que dans la microstructure initiale de l'acier 16MND5.

La fonction densité de probabilité peut être déduite de l'équation (VI.61) par la relation :

$$f(r_c) = \frac{dP(r_c)}{dr_c} = \frac{2m}{b} \left(\frac{2r_c - a}{b}\right)^{m-1} \exp\left[-\left(\frac{2r_c - a}{b}\right)^m\right] \quad (VI.62)$$

La taille moyenne de carbures  $r_{cmoy}$  est définie par l'espérance mathématique de la variable  $r$  :

$$r_{c\text{ moy}} = E(r) = \int_0^{+\infty} f(r) r \, dr \quad (\text{VI.63})$$

Par combinaison des équations (VI.62) et (VI.63), on peut en déduire la valeur de  $r_{c\text{ moy}}$  dans le cas de la distribution de Lee *et al.* On trouve  $r_{c\text{ moy}} = 0,052 \, \mu\text{m}$ . En prenant  $\gamma_s = 2 \, \text{J}\cdot\text{m}^{-2}$ ,  $E = 210000 \, \text{MPa}$  et  $\nu = 0,29$ , l'équation (VI.60) permet d'exprimer la contrainte de Griffith  $\sigma_c$  en fonction de  $r_c$ . Pour  $r_{c\text{ moy}} = 0,052 \, \mu\text{m}$ , on trouve  $\sigma_{c\text{ moy}} = 3700 \, \text{MPa}$  (figure VI.8).

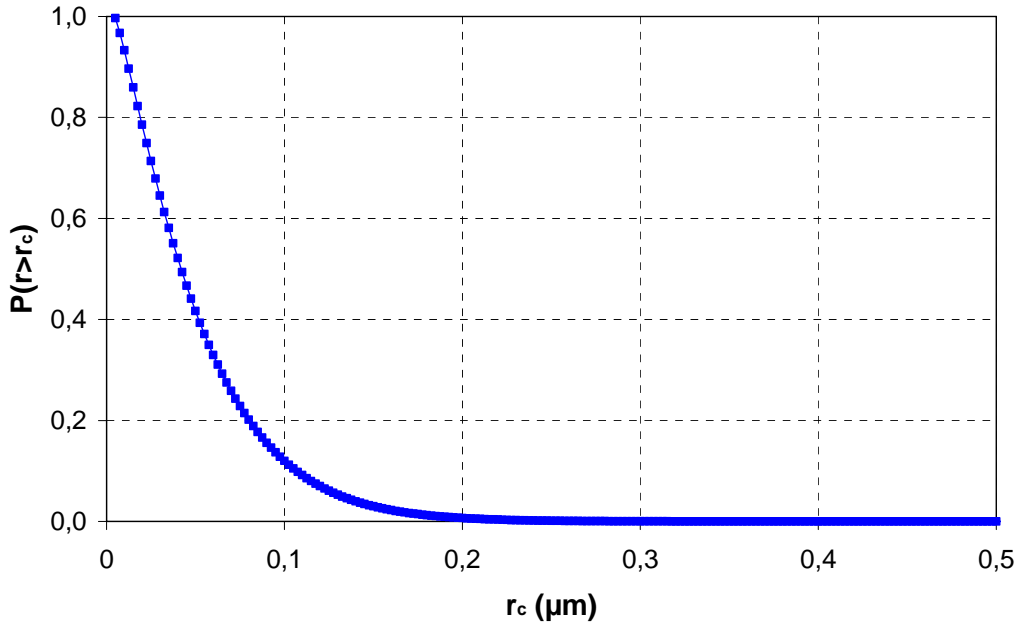


Fig. VI.7 : Distribution des tailles de défauts proposée par Lee *et al.*

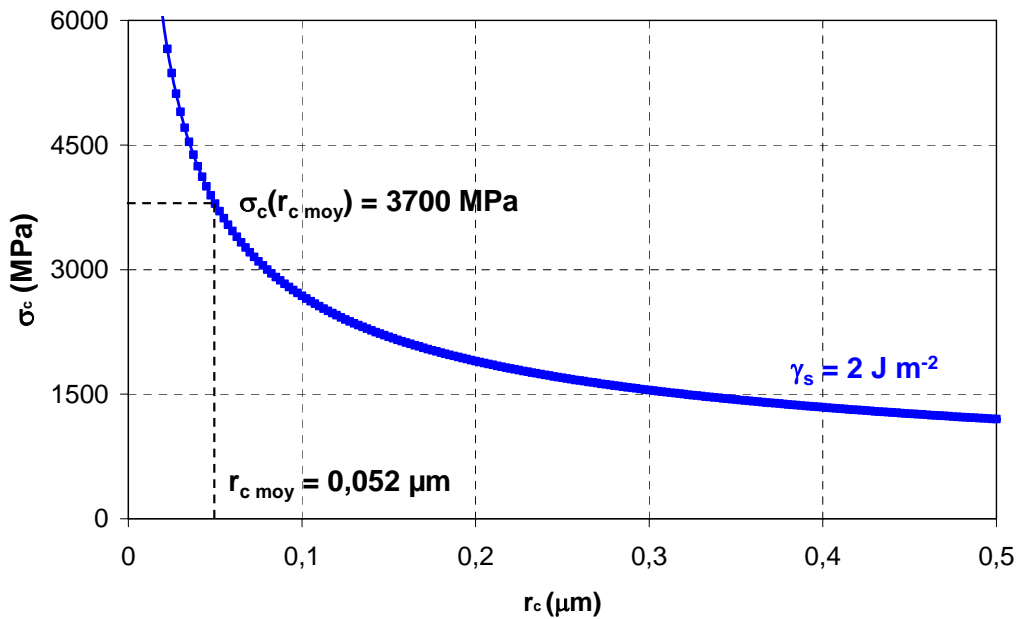


Fig. VI.8 : Expression de la contrainte de clivage d'après le critère de Griffith ( $\gamma_s = 2 \, \text{J}\cdot\text{m}^{-2}$ )

A l'échelle d'un paquet de lattes bainitique ( $i$ ), on considère qu'il y a rupture lorsque la contrainte moyenne dans le paquet  $\sigma_l^i$  atteint la valeur critique  $\sigma_{cmoy}$ . On néglige les hétérogénéités internes aux paquets de lattes, et on fait l'hypothèse que  $\sigma_l^i$  suit la même distribution dans l'agrégat que la contrainte locale  $\sigma_l$ . Cette hypothèse est très simplificatrice : on montre en effet dans le chapitre V que les contraintes locales  $\sigma_l$  sont très hétérogènes à l'intérieur des paquets de lattes.

Afin de calculer la probabilité d'amorçage de la rupture de l'agrégat de volume  $(50 \mu\text{m})^3$ , on fait une hypothèse de type 'maillon le plus faible' : dès lors que la contrainte principale excède le valeur critique  $\sigma_{cmoy}$  dans un paquet de lattes, il y a amorçage de la rupture dans le paquet de lattes et dans l'agrégat (on néglige les phénomènes de franchissement des interfaces entre paquets de lattes). La probabilité de rupture  $P_{RO}^i(\sigma_l^i)$  d'un paquet de lattes vaut donc :

$$P_{RO}^i(\sigma_l^i) = P(\sigma_l^i > \sigma_{cmoy}) \quad (\text{VI.64})$$

Pour une contrainte principale moyenne  $\langle \sigma_l \rangle$ , la probabilité de rupture de l'agrégat s'écrit par conséquent :

$$P_{RO}(\langle \sigma_l \rangle) = 1 - \prod_i [1 - P_{RO}^i(\sigma_l^i)] \quad (\text{VI.65})$$

Si on suppose que l'amorçage du clivage est équiprobable dans chaque paquet de lattes, on obtient :

$$P_{RO}(\langle \sigma_l \rangle) = 1 - [1 - P(\sigma_l > \sigma_{cmoy})]^N \quad (\text{VI.66})$$

$N$  désignant le nombre de 'maillons' constituant l'agrégat : en prenant des paquets de lattes de taille  $10 \mu\text{m}^3$ ,  $N$  vaut 125.

Pour décrire les hétérogénéités locales de  $\sigma_l$ , nous avons proposé et identifié une fonction de distribution de type Gumbel de première espèce (cf. chapitre V). La probabilité que  $\sigma_l$  excède une valeur critique  $\sigma_{cmoy}$  peut s'écrire sous la forme :

$$P(\sigma < \sigma_l) = 1 - \exp \left[ - \exp \left( - \frac{\sigma_l - \langle \sigma_l \rangle}{\alpha \langle \sigma_{mises} \rangle + \beta(T)} + \Gamma'(1) \right) \right] \quad (\text{VI.67})$$

Nous avons également proposé plusieurs lois de dépendance en température pour le paramètre  $\beta$ , ce qui permet d'exprimer les distributions de  $\sigma_l$  dans la bainite pour n'importe quelle valeur des paramètres  $\langle \sigma_l \rangle$ ,  $\langle \sigma_{mises} \rangle$  et  $T$ . Toutefois, dans le cadre de ce chapitre, nous restreignons l'étude aux valeurs de  $T$  auxquelles  $\beta$  a été identifié, à savoir  $-60^\circ\text{C}$ ,  $-90^\circ\text{C}$ ,  $-150^\circ\text{C}$  et  $-196^\circ\text{C}$ . En combinant les équations (VI.66) et (VI.67), il est finalement possible d'explicitier la probabilité de rupture de l'agrégat  $P_{RO}(\sigma_l)$  en fonction de  $\sigma_{cmoy}$ ,  $\langle \sigma_l \rangle$ ,  $\beta$  et  $N$  :

$$P_{RO}(\langle \sigma_l \rangle) = 1 - \left[ \exp \left[ - \exp \left( - \frac{\sigma_l - \langle \sigma_l \rangle}{\alpha \langle \sigma_{mises} \rangle + \beta(T)} + \Gamma'(1) \right) \right] \right]^N \quad (\text{VI.68})$$



Comme pour la plupart des modèles d'approche locale, on obtient une expression de la probabilité de rupture du volume élémentaire  $P_{R0}$  en fonction de la contrainte principale moyenne  $\langle \sigma_I \rangle$ . La seule différence est que l'on prend en compte les hétérogénéités de contraintes dans l'agrégat, alors que  $\sigma_I$  est supposée homogène dans le volume élémentaire du modèle de Beremin. Les paramètres  $\sigma_{cmoy}$  et  $\beta$  expriment l'effet des hétérogénéités mécaniques, tandis que  $N$  est relié à la microstructure.

La probabilité de rupture  $P_{R0}(\langle \sigma_I \rangle)$  peut également s'exprimer directement en fonction du niveau de triaxialité  $\chi$ : en déformations planes, et sous certaines hypothèses, on peut effectivement relier  $\langle \sigma_{mises} \rangle$  à  $\langle \sigma_I \rangle$  et  $\chi$  (cf chapitre V) :

$$\langle \sigma_{mises} \rangle = \frac{\sqrt{3}(k-1)}{2k} \langle \sigma_I \rangle \quad \text{avec} \quad k = \frac{\chi\sqrt{3}+1}{\chi\sqrt{3}-1} \quad (\text{VI.69})$$

A partir de l'équation (VI.68), il est donc possible d'étudier l'effet de  $\langle \sigma_I \rangle$ ,  $\chi$  et  $T$  sur la probabilité de rupture du volume élémentaire, et de comparer les résultats donnés par ce critère à ceux donnés par le modèle de Beremin ou l'approche de Mathieu *et al* [MAT06].

## VI.C.2 Application du critère

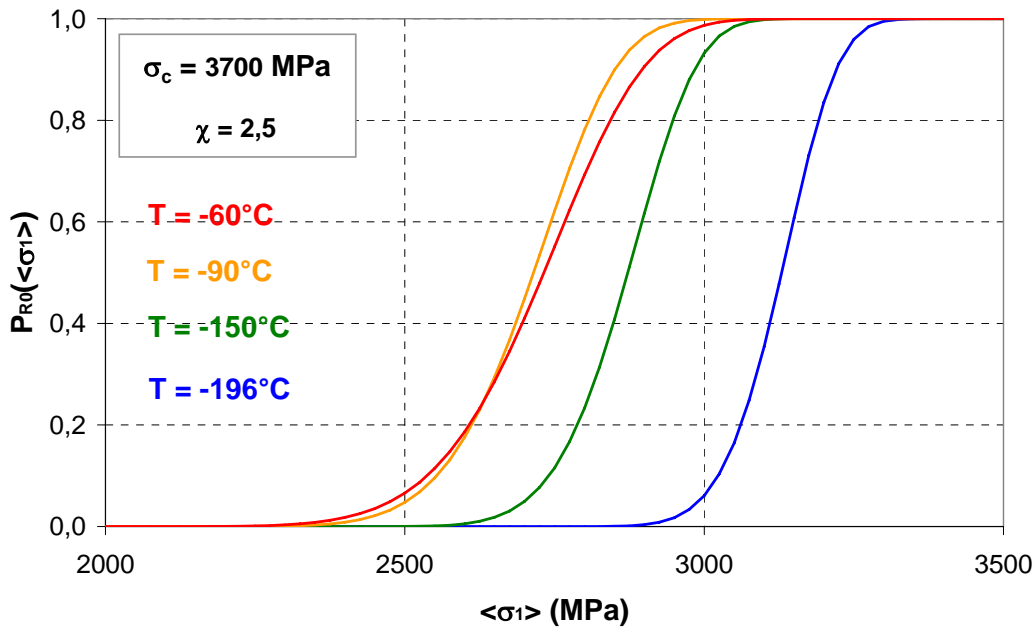
Nous avons étudié l'évolution de la probabilité de rupture du volume élémentaire  $P_{R0}$ , donnée par l'équation (VI.68), en fonction de la contrainte moyenne  $\langle \sigma_I \rangle$  pour 4 valeurs différentes de  $T$ :  $-60^\circ\text{C}$ ,  $-90^\circ\text{C}$ ,  $-150^\circ\text{C}$  et  $-196^\circ\text{C}$ . Il s'agit des 4 valeurs de température auxquelles le paramètre  $\beta$  a été identifié.

### a) Etude de l'effet de $T$

La figure VI.9 représente l'évolution de la probabilité de rupture du volume élémentaire  $P_{R0}$  en fonction de la contrainte principale moyenne  $\langle \sigma_I \rangle$  pour les 4 niveaux de température étudiés. Il apparaît que  $P_{R0}$  croît avec  $\langle \sigma_I \rangle$ . Même pour  $T = -196^\circ\text{C}$ , il existe une dispersion des valeurs de  $\langle \sigma_I \rangle$  conduisant à la rupture du volume élémentaire.

Les dispersions de contraintes à rupture augmentent avec la température. Ce résultat est en accord avec les résultats des essais de ténacité présentés dans le chapitre III. Toutefois, ces essais ne donnent pas d'information directe sur la probabilité de rupture à l'échelle du volume élémentaire de l'approche locale. Il serait intéressant de comparer les dispersions de  $P_{R0}$  obtenues par notre approche à celles prédites par le modèle de Beremin pour l'acier de cuve 16MND5.

D'autre part, si on se place à  $\langle \sigma_I \rangle$  fixée, on note une augmentation de  $P_{R0}$  lorsque  $T$  augmente. Cette relation entre  $P_{R0}$  et  $T$  (à  $\langle \sigma_I \rangle$  fixée) peut s'expliquer par l'augmentation de la déformation et des hétérogénéités de  $\sigma_I$  avec  $T$ .



**Fig. VI.9 :** Evolution de la probabilité de rupture  $P_{R0}$  du volume élémentaire en fonction de  $\langle \sigma_I \rangle$  pour différentes valeurs de  $T$  ( $\chi = 2,5$ )

Dans ses travaux, Mathieu [MAT06] montre par contre que lorsque l'énergie de surface effective  $\gamma_{eff}$  est considérée constante, la probabilité de rupture du volume élémentaire  $P_{R0}$  ne dépend pas significativement de  $T$ . En introduisant une dépendance de  $\gamma_{eff}$  en température, il retrouve la dépendance classiquement admise : à contrainte  $\langle \sigma_I \rangle$  fixée, la probabilité de rupture  $P_{R0}$  est d'autant plus élevée que la température est faible.

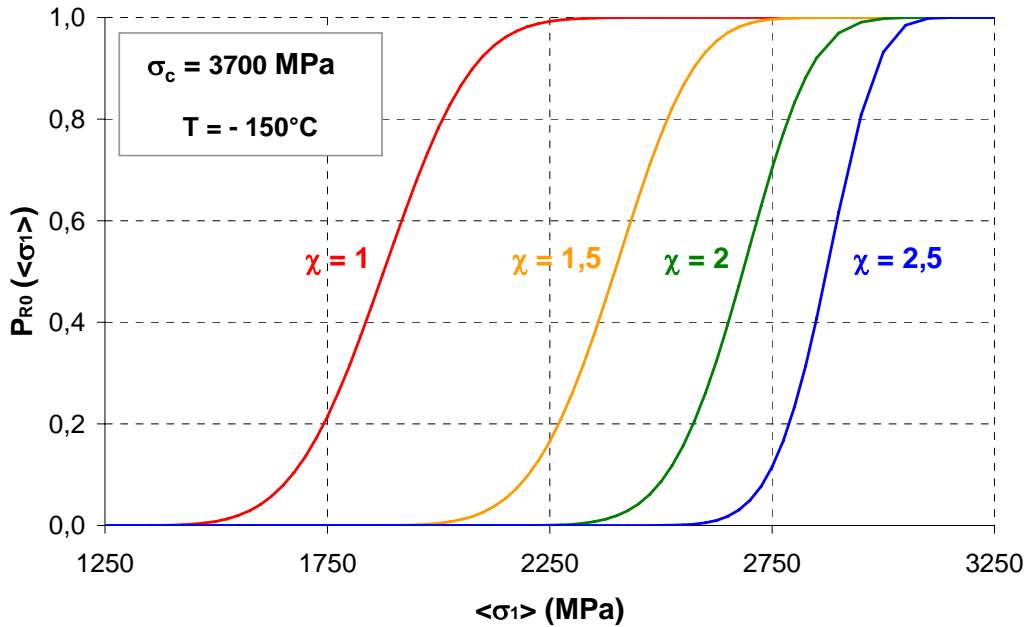
De plus, il faut souligner que la distribution des tailles de carbures n'est pas prise en considération dans notre critère. Or, les températures faibles et les triaxialités élevées correspondent à des états peu déformés : les hétérogénéités de  $\sigma_I$  sont donc assez faibles et elles ne permettent pas d'expliquer la rupture fragile. A l'inverse, les défauts susceptibles de conduire à l'amorçage du clivage sont d'autant plus nombreux que  $\sigma_I$  est élevée : le caractère probabiliste du clivage à basse température (et / ou à  $\chi$  élevée) résulte plutôt de la dispersion des défauts que des hétérogénéités mécaniques. La modélisation proposée ici ne permet donc pas de rendre pleinement compte de l'effet de la température sur  $P_{R0}$ .

Pour que la probabilité de rupture du volume élémentaire augmente lorsque  $T$  décroît, il faut donc impérativement prendre en compte la taille de défauts dans le calcul de  $P_{R0}$ .

### b) Etude de l'effet de $\chi$

La figure VI.10 représente l'évolution de  $P_{R0}$  pour 4 niveaux de triaxialité :  $\chi = 1$ ,  $\chi = 1,5$ ,  $\chi = 2$  et  $\chi = 2,5$ . La température est fixée à  $T = -150^\circ\text{C}$  pour les quatre niveaux de  $\chi$ . Si on fixe la contrainte principale moyenne  $\langle \sigma_I \rangle$  dans le volume  $V_0$ , il apparaît que la probabilité de rupture  $P_{R0}$  augmente lorsque  $\chi$  diminue.

Plus  $\chi$  diminue et plus  $\sigma_I$  est hétérogène dans le volume  $V_0$  : à  $\langle \sigma_I \rangle$  fixée, on trouve donc des contraintes locales plus élevées. Avec un critère basé uniquement sur les hétérogénéités mécaniques, ceci explique l'augmentation de  $P_{R0}$ .



**Fig. VI.10** : Evolution de la probabilité de rupture  $P_{R0}$  du volume élémentaire en fonction de  $\langle \sigma_I \rangle$ , pour  $\chi = 1,5$  ou  $2,5$  ( $T = -150^\circ\text{C}$ )

D'autre part, les dispersions de valeurs de  $P_{R0}$  augmentent lorsque  $\chi$  décroît. Or, les hétérogénéités de  $\sigma_I$  sont une fonction décroissante de  $\chi$ , et ce quelle que soit  $\langle \sigma_I \rangle$  : il n'est donc pas surprenant de retrouver la même relation entre  $\chi$  et  $P_{R0}$ .

Il reste à déterminer si, pour l'acier 16MND5, la prédiction des dispersions de  $P_{R0}$  est en accord avec d'autres modèles d'approche locale de la rupture, ou si le fait de négliger la distribution des tailles de carbures modifie complètement les dispersions de  $P_{R0}$ .

### VI.C.3 Comparaison avec les résultats donnés par les modèles d'approche locale de la rupture

Les résultats donnés par notre modèle sont comparés à ceux prédits par le modèle de Beremin pour différentes nuances d'aciers de cuve bainitiques. La comparaison porte sur les dispersions de valeurs de  $P_{R0}$  et sur les valeurs de  $\langle \sigma_I \rangle$  correspondantes.

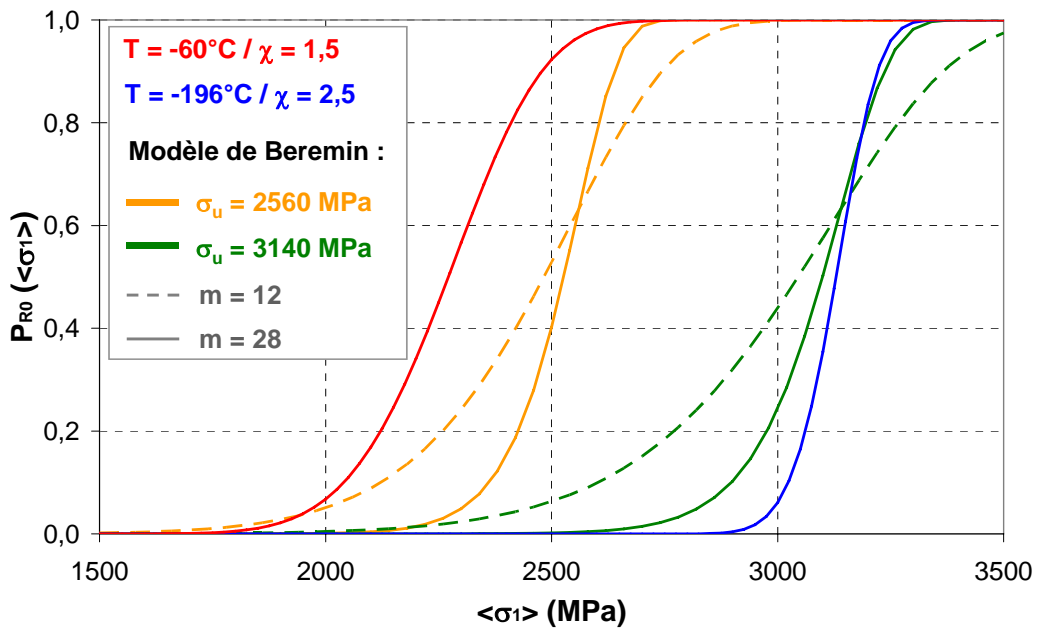
#### a) Comparaison avec le modèle de Beremin

Beremin *et al.* ont identifié les paramètres  $\sigma_u$  et  $m$  pour différentes nuances d'aciers de cuve bainitiques [BER83] : ces valeurs sont assez proches de celles obtenues par Carassou [CAR99]. Les valeurs de  $m$ ,  $\sigma_u$  et  $V_0$  sont récapitulées dans le tableau VI.2. D'après ces données identifiées pour un acier 16MND5 à partir d'essais macroscopiques (éprouvettes AE

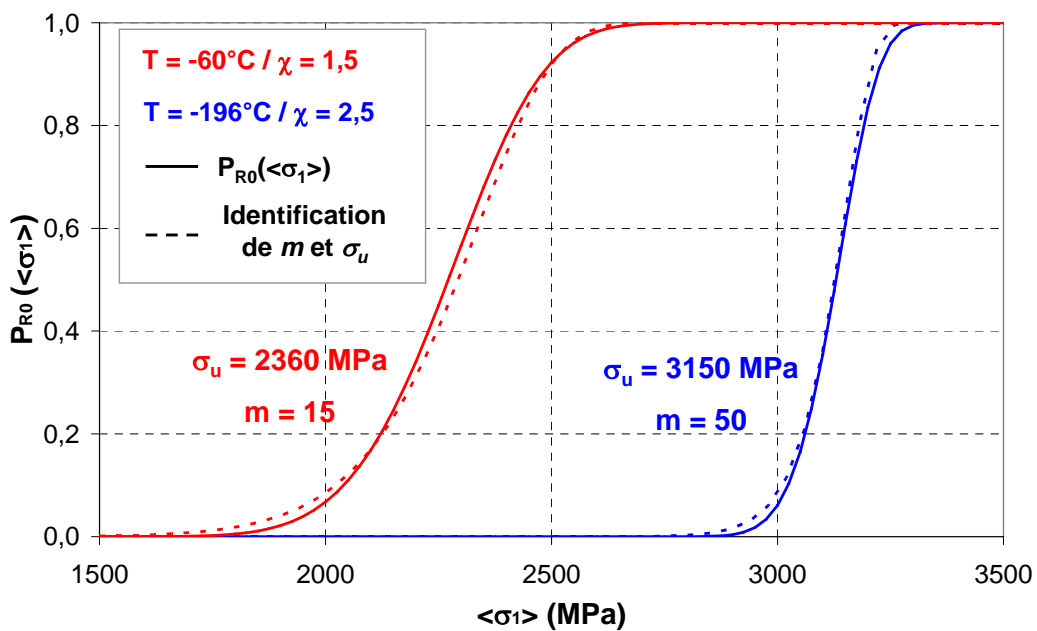
et CT), on peut considérer que  $m$  varie entre les bornes extrêmes  $m = 12$  et  $m = 28$ , et  $\sigma_u$  de 2560 à 3140 MPa. Dans notre approche, les distributions de  $P_{R0}$  dépendant à la fois de  $T$  et  $\chi$ , nous nous sommes intéressés aux deux cas extrêmes :

- le cas de figure  $T = -60^\circ\text{C} / \chi = 1,5$ , qui conduit aux plus fortes dispersions de  $P_{R0}$  ;
- le cas de figure  $T = -196^\circ\text{C} / \chi = 2,5$ , qui conduit aux plus faibles dispersions de  $P_{R0}$ .

La figure VI.11 présente une comparaison entre les distributions extrêmes de  $P_{R0}$  prédites par le modèle de Beremin et celles calculées par notre approche.



**Fig. VI.11 :** Comparaison des distributions extrêmes de  $P_{R0}$  avec celles données par le modèle de Beremin [BER83], [CAR99]



**Fig. VI.12 :** Identification de  $m$  et  $\sigma_u$  à partir des distributions  $P_{R0} = f(\langle\sigma_1\rangle)$

Les résultats de la figure VI.11 suggèrent que le modèle d'approche locale 'englobe' tout le spectre des valeurs de  $m$  et  $\sigma_u$  données dans la littérature. Nous avons identifié les valeurs de  $m$  et  $\sigma_u$  à partir des courbes  $P_{R0} = f(\langle \sigma_I \rangle)$  les deux cas extrêmes  $T = -60^\circ\text{C} / \chi = 1,5$  et  $T = -196^\circ\text{C} / \chi = 2,5$  (cf. figure VI.12) : on trouve  $m = 15$  à  $T = -60^\circ\text{C}$  et  $= 50$  à  $T = -196^\circ\text{C}$ . Les valeurs de  $m$  et  $\sigma_u$  sont récapitulées dans le tableau VI.2.

	Modèle	Beremin [BER83]	Carassou [CAR99]
$\sigma_u$	2560-2800	2560-3140	2860-3140
$m$	15-50	22	12-28
$V_0$	$(50\mu\text{m})^3$	$(50\mu\text{m})^3$	$(50\mu\text{m})^3$

**Tableau VI.2 :** Récapitulatif de la gamme de valeurs de  $m$  et  $\sigma_u$  identifiées dans la littérature

Pour  $T = -196^\circ\text{C}$  et  $\chi = 2,5$ , on montre que les dispersions de  $P_{R0}$  sont plus faibles que celles prédites par le modèle de Beremin. Ceci est logique dans la mesure où notre modèle ne tient pas compte des dispersions des tailles de carbures. A  $T = -60^\circ\text{C}$ , les dispersions de  $P_{R0}$  sont incluses dans les bornes extrémales données dans la littérature.

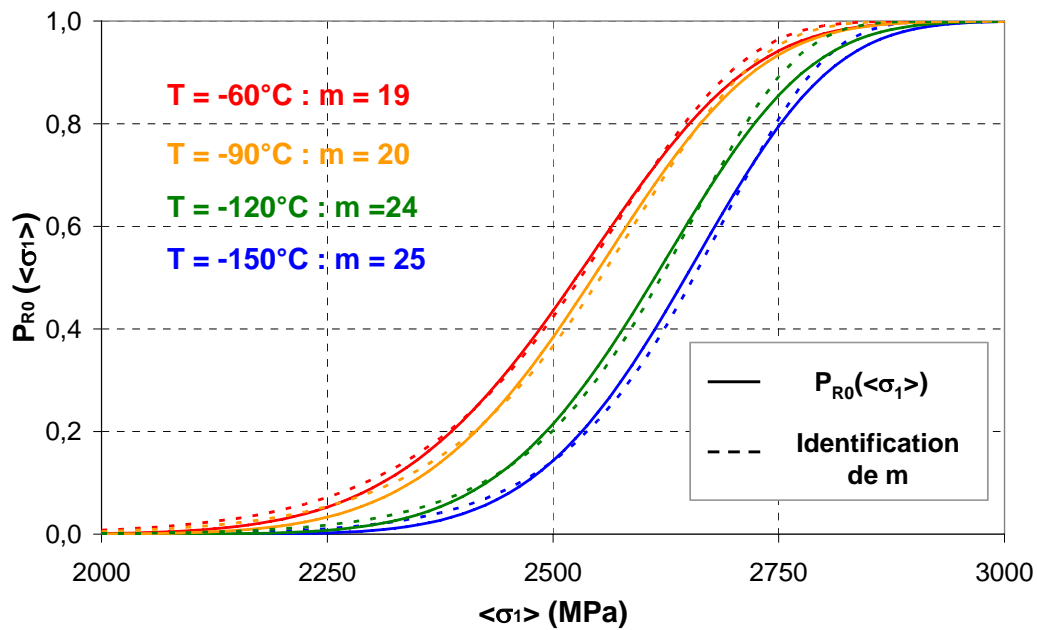
Les valeurs de  $\sigma_u$  obtenues dans la littérature sont également compatibles avec notre approche de la rupture fragile : il faut toutefois noter que l'évolution en température des courbes  $P_{R0} = f(\langle \sigma_I \rangle)$  est en contradiction avec la dépendance de  $\sigma_u(T)$  décrite dans d'autres modèles d'approche locale de la rupture : dans ses travaux de thèse, Hausild [HAU02] identifie les paramètres  $m$  et  $\sigma_u$  du modèle de Beremin et il montre que le paramètre  $\sigma_u$  doit être pris comme étant une fonction croissante de  $T$ .

### b) Comparaison avec l'approche de Mathieu *et al.*

D'autre part, nous avons également comparé notre modèle d'approche locale à celui proposé par Mathieu [MAT06]. Mathieu a également identifié le modèle de Beremin sur les courbes  $P_{R0} = f(\langle \sigma_I \rangle)$  calculées pour  $\chi = 2$  et pour 4 valeurs de  $T$  :  $-60^\circ\text{C}$ ,  $-90^\circ\text{C}$ ,  $-120^\circ\text{C}$  et  $-150^\circ\text{C}$ . Dans ses travaux, Mathieu a d'abord supposé que l'énergie de surface  $\gamma_{eff}$  était constante et égale à  $10 \text{ J m}^{-2}$ . Il a ensuite introduit une dépendance de  $\gamma_{eff}$  en température, en s'inspirant de la formulation du modèle WST [WST84].

La figure VI.13 présente les courbes  $P_{R0} = f(\langle \sigma_I \rangle)$  pour ces 4 valeurs de  $T$ . Nous avons également identifié le modèle de Beremin sur ces courbes afin de comparer nos résultats avec ceux de Mathieu. Les résultats sont récapitulés dans le tableau VI.3.

Les résultats suggèrent que  $m$  décroît légèrement et que  $\sigma_u$  augmente lorsque  $T$  augmente. D'autre part, les valeurs de  $m$  sont assez comparables avec celles obtenues par Mathieu avec  $\gamma_{eff} = 10 \text{ J m}^{-2}$ , excepté à  $T = -150^\circ\text{C}$ . Lorsqu'il considère  $\gamma_{eff}$  dépendant de  $T$ , il obtient des valeurs de  $m$  comparables aux nôtres à  $T = 60^\circ\text{C}$  et  $-90^\circ\text{C}$ , mais plus élevées à  $T = -120^\circ\text{C}$  et  $-150^\circ\text{C}$ . Nous obtenons des valeurs de  $\sigma_u$  de l'ordre de 2500 à 2700 MPa contre 1500 à 1900 MPa pour Mathieu.



**Fig. VI.13 :** Identification de  $m$  et  $\sigma_u$  sur les courbes  $P_{R0} = f(\langle \sigma_1 \rangle)$  pour différentes valeurs de  $T$  ( $\chi = 2$ )

	$T = -60^\circ\text{C}$	$T = -90^\circ\text{C}$	$T = -120^\circ\text{C}$	$T = -150^\circ\text{C}$
Libert : $\gamma_{eff} = 2 \text{ Jm}^{-2}$	19	20	24	25
Mathieu : $\gamma_{eff} = 10 \text{ Jm}^{-2}$	25	25	27	36
Mathieu : $\gamma_{eff} = f(T)$	18	23	36	54

**Tableau VI.3 :** Comparaison des valeurs de  $m$  obtenues entre notre modèle d'approche locale et celui de Mathieu [MAT06]

En définitive, par une approche locale ne prenant en compte que les hétérogénéités mécaniques, nous parvenons à décrire de façon assez satisfaisante la dispersion des probabilités à rupture dans le volume élémentaire de l'approche locale :

- Les résultats sont en accord avec le modèle de Beremin identifié pour l'acier 16MND5, même si nous ne retrouvons pas la même dépendance de  $\sigma_u$  en température. Cette différence peut provenir de l'effet de la distribution des tailles de carbures, qui n'est pas prise en compte dans notre approche.
- Les dispersions de probabilité à rupture sont assez cohérentes avec celles obtenues par Mathieu. Cependant, notre approche conduit à un moins grand effet de la température sur les dispersions de  $P_{R0}$ .

Les résultats montrent en définitive que, si on fait l'hypothèse d'une taille de carbures homogène dans l'agrégat, les dispersions de contrainte à rupture peuvent être expliquées en partie par les hétérogénéités mécaniques. Il est néanmoins primordial d'introduire l'effet des dispersions de tailles de défauts, qui jouent un rôle d'autant plus important que la température est basse, c'est-à-dire lorsque les hétérogénéités mécaniques sont faibles.

## VI.D Formulation d'un modèle d'approche locale de la rupture tenant compte des hétérogénéités de $\sigma_I$ et de la distribution des tailles de carbures

### VI.D.1 Ecriture du critère d'amorçage du clivage

#### a) Ecriture à l'échelle du défaut

On s'intéresse à la probabilité d'amorçage du clivage sur un carbure de taille  $r_c$ . D'après la littérature, la densité volumique de carbures est de l'ordre de  $10^{18} \text{ m}^{-3}$  pour un acier 16MND5 [ORT05]. Ceci signifie qu'un volume  $1 \mu\text{m}^3$  contient en moyenne un carbure. Or à cette échelle, la probabilité que la contrainte principale  $\sigma_I$  excède  $\sigma_c$  est donnée par la distribution de Gumbel. Il est donc possible de relier la distribution des champs locaux (identifiée dans le chapitre V) à l'amorçage du clivage sur un défaut pris individuellement. Par le critère de Griffith, on peut associer une contrainte critique  $\sigma_c$  d'amorçage du clivage à un carbure de taille  $r_c$  :

$$\sigma_c = \sqrt{\frac{\pi E \gamma_s}{2(1-\nu^2)r_c}} \quad (\text{VI.70})$$

L'amorçage du clivage sur un défaut de taille  $r_c$  résulte de deux événements supposés indépendants :

- le défaut pris au hasard est de taille  $r_c$ , laquelle est donnée par la fonction densité de probabilité  $dP(r_c) = f(r_c)$ , déjà exprimée dans l'équation (VI.62) ;
- La contrainte principale locale  $\sigma_I$  excède  $r_c$  : la probabilité de cet événement est donnée par la fonction de Gumbel identifiée dans le chapitre V.

Si on suppose les deux événements indépendants, cela revient à considérer que la présence des carbures ne modifie pas les champs de contraintes localement. Il s'agit d'une hypothèse très simplificatrice. La probabilité d'amorçage du clivage sur un carbure de taille  $r_c$  s'écrit alors :

$$dP_{RO}(r_c) = f(r_c) \cdot P(\sigma_I > \sigma_c) \quad (\text{VI.71})$$

En combinant l'expression de  $f(r_c)$  donnée dans l'équation (VI.62) à celle de  $P(\sigma > \sigma_c)$  donnée dans l'équation (VI.67), on obtient l'expression suivante :

$$dP_{RO}(r_c) = \frac{2m}{b} \left( \frac{2r_c - a}{b} \right)^{m-1} \exp \left[ - \left( \frac{2r_c - a}{b} \right)^m \right] \left[ 1 - \exp \left[ - \exp \left( - \frac{\sigma_c - \sigma_I}{\alpha < \sigma_{mises} > + \beta(T)} + \Gamma'(l) \right) \right] \right] \quad (\text{VI.72})$$

Cette expression fait intervenir les paramètres de la distribution des tailles de carbures  $a$ ,  $b$  et  $m$ , déjà utilisés dans le sous-chapitre VI.C. La valeur de  $\sigma_c$  est déduite de  $r_c$  par la relation de Griffith (équation VI.69). L'énergie de surface  $\gamma_{eff}$  supposée constante et égale à  $2 \text{ J m}^{-2}$ . En ce

qui concerne les paramètres  $\alpha$  et  $\beta$ , nous utilisons la relation identifiée dans le chapitre V, à partir des résultats de simulation numérique. Si on se donne des valeurs de  $\langle \sigma_I \rangle$ ,  $\chi$ , et  $T$ , il est ainsi possible d'exprimer la fonction  $dP_{R0}$  en fonction de la taille de défaut  $r_c$ .

### b) Ecriture à l'échelle du volume élémentaire $V_0$

Le calcul de  $dP_{R0}$  ne donne que la probabilité d'amorçage du clivage pour une taille de carbures  $r_c$  fixée. Or, dans le volume élémentaire de l'approche locale, on rencontre une population de carbures de tailles diverses : chacun de ces défauts de taille  $r_c$  peut occasionner la rupture si  $\sigma_I$  excède localement la valeur critique  $\sigma_c(r_c)$ .

Du fait des concentrations de contraintes principales dans l'agrégat, l'ensemble de la population des carbures peut potentiellement devenir critique ; pour calculer la probabilité d'amorçage de la rupture dans le volume  $V_0$ , il faut reprendre l'expression de la densité de probabilité  $dP_{R0}(r_c)$  et l'intégrer sur l'ensemble de la population des carbures dans le volume  $V_0$ :

$$P_{R0} = \int_{a/2}^{\infty} dP_{R0}(r_c) \cdot dr_c \quad (\text{VI.73})$$

$$P_{R0} = \int_{a/2}^{\infty} f(r_c) P(\sigma_I > \sigma_c) \cdot dr_c \quad (\text{VI.74})$$

Là encore, on suppose que le volume élémentaire de l'approche locale est représentatif vis-à-vis de la distribution des tailles de carbures. Par ailleurs, le calcul de  $P_{R0}$  prend en compte tous les carbures : il n'y a plus de notion de seuil arbitraire. Tous les défauts peuvent devenir critiques vis-à-vis de l'amorçage du clivage, à condition que  $\sigma_I$  atteigne localement  $\sigma_c(r_c)$ . C'est cette approche que nous avons utilisée par la suite pour calculer la probabilité de rupture  $P_{R0}$ .

Dans l'équation (VI.74), on remarque cependant que  $P_{R0}$  dépend de la fonction de répartition des tailles de défauts, mais pas directement de la densité volumique de carbures dans l'agrégat.

#### VI.D.2 Evolution de la probabilité d'amorçage $dP_{R0}(r_c)$ en fonction de $\langle \sigma_I \rangle$ , $T$ , $\chi$ et $\langle \mathcal{E}_{eq}^p \rangle$

La fonction  $dP_{R0} = f(r_c)$ , donnée dans l'équation (VI.72), définit la probabilité d'amorçage du clivage autour d'un carbure de taille  $r_c$ .

D'une part, cette fonction permet également d'étudier la nocivité des carbures suivant leur taille : le maximum de la fonction  $dP_{R0}$  correspond à une taille de carbure critique  $r_c^{max}$  pour laquelle la probabilité d'amorçage du clivage est maximale.

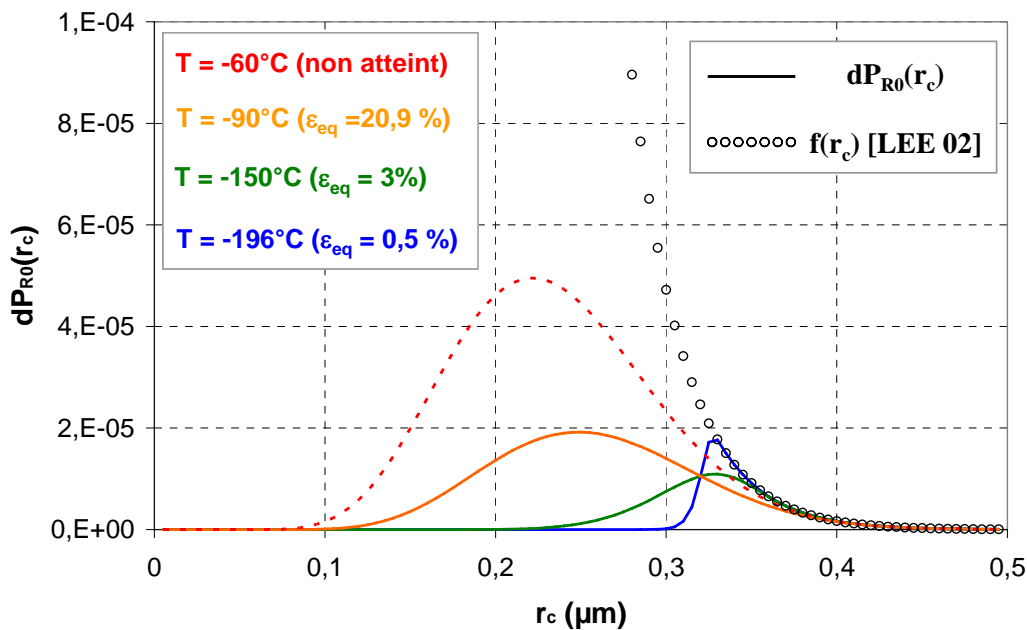
D'autre part, l'étalement des courbes  $dP_{R0}(r_c)$  nous indique quelles sont les tailles de carbures pour lesquelles il peut y avoir amorçage du clivage. Lorsque la fonction  $dP_{R0} = f(r_c)$  est étalée, les plus 'petits' carbures deviennent nocifs vis-à-vis du clivage. A l'inverse, si la fonction  $dP_{R0}$  est peu dispersée, seuls les 'gros' carbures sont susceptibles de conduire à l'amorçage du clivage.



L'évolution de la fonction  $dP_{R0} = f(r_c)$  dépend des distributions de  $\sigma_I$  : elle doit en principe fortement dépendre des paramètres de chargement  $\langle \sigma_I \rangle$ ,  $T$ ,  $\chi$  et  $\langle \mathcal{E}_{eq}^p \rangle$ .

**a) Etude à  $\langle \sigma_I \rangle$  fixée : effet de  $T$  et  $\chi$  sur l'évolution de  $dP_{R0}(r_c)$**

Dans un premier temps, nous étudions l'influence de la température sur les courbes  $dP_{R0}(r_c)$  en fixant  $\langle \sigma_I \rangle$  et  $\chi$ . Quatre valeurs de  $T$  sont étudiées :  $-60^\circ\text{C}$ ,  $-90^\circ\text{C}$ ,  $-150^\circ\text{C}$  et  $-196^\circ\text{C}$ . Les figures VI.14 et VI.15 représentent les courbes de  $dP_{R0}(r_c)$  pour ces 4 valeurs de  $T$  et pour  $\langle \sigma_I \rangle = 1500 \text{ MPa} / \chi = 1,5$  et  $\langle \sigma_I \rangle = 2000 \text{ MPa} / \chi = 2,5$  respectivement. La distribution des tailles de carbures  $f(r_c)$  est également représentée.

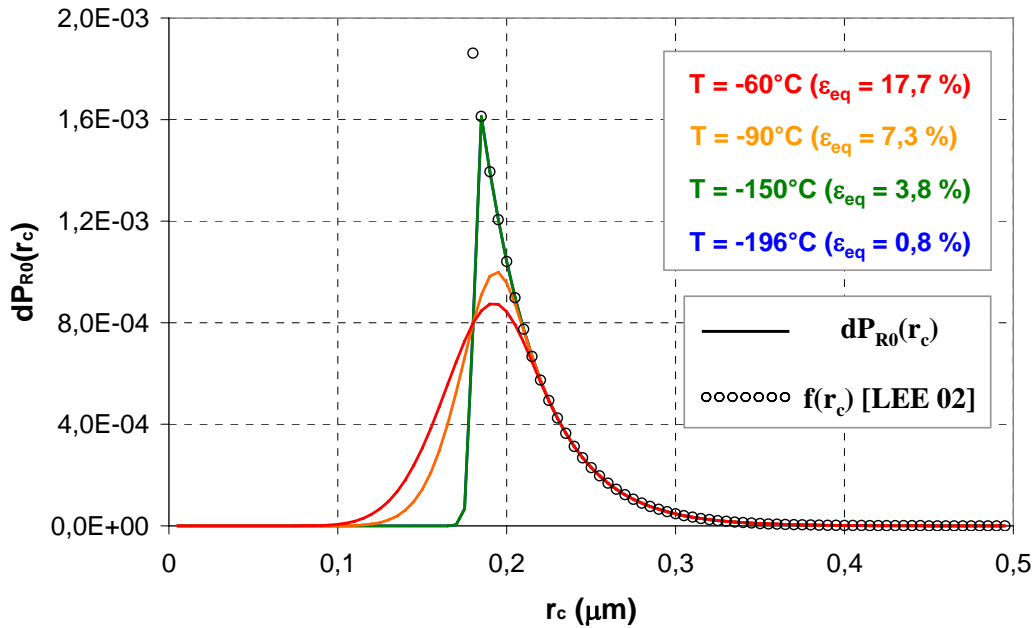


**Fig. VI.14 :** Evolution de  $dP_{R0}(r_c)$  en fonction de  $T$  pour  $\langle \sigma_I \rangle = 1500 \text{ MPa}$  et  $\chi = 1,5$  / Comparaison avec la fonction densité  $f(r_c)$

La figure VI.14 montre que l'allure des courbes  $dP_{R0}(r_c)$  est très sensible à la température. La taille de carbure critique  $r_c^{max}$  est d'autant plus faible que la température est élevée :

- A  $T = -196^\circ\text{C}$ , les valeurs de  $dP_{R0}$  sont peu dispersées, les carbures les plus gros ( $r_c = 0,3$  à  $0,4 \mu\text{m}$ ) sont les plus nocifs. La distribution des valeurs de  $dP_{R0}$  est très proche de la distribution des tailles de carbures  $f(r_c)$ .
- A  $T = -150^\circ\text{C}$ , les dispersions de  $dP_{R0}$  sont un peu plus élevées. La taille de carbures critique est comprise entre  $r_c = 0,2$  et  $0,4 \mu\text{m}$ .
- A  $T = -90^\circ\text{C}$ , les dispersions de  $dP_{R0}$  sont beaucoup plus élevées. Ce cas de figure correspond à une déformation plastique équivalente moyenne  $\langle \mathcal{E}_{eq}^p \rangle$  de l'ordre de 20%. L'amorçage du clivage peut se produire pour des tailles de carbures allant de  $r_c = 0,1 \mu\text{m}$  à  $0,4 \mu\text{m}$ . Cette forte dispersion peut être expliquée par les fortes hétérogénéités de  $\sigma_I$ .

- Le cas  $T = -60^\circ\text{C}$  est tracé en pointillés : la fonction de distribution des valeurs de  $\sigma_I$  est ici extrapolée à un état fortement localisé pour lequel elle n'a pas été identifiée (cf. chapitre V). Par conséquent, ce cas de figure n'est pas discuté



**Fig. VI.15 :** Evolution de  $dP_{R0}(r_c)$  en fonction de  $T$  pour  $\langle \sigma_I \rangle = 2000 \text{ MPa}$  et  $\chi = 2,5$  / Comparaison avec la fonction densité  $f(r_c)$

L'étude de la figure VI.15 conduit aux mêmes remarques que celles formulées dans le cas de figure  $\langle \sigma_I \rangle = 1500 \text{ MPa}$  /  $\chi = 1,5$ . Cependant, l'effet de la température sur l'allure des courbes  $dP_{R0}(r_c)$  est nettement moins marqué. Les valeurs de  $r_c$  conduisant à l'amorçage du clivage sont plus faibles et moins dispersées ( $0,1 < r_c < 0,3 \mu\text{m}$ ). D'autre part, à  $T = -150^\circ\text{C}$  et  $-196^\circ\text{C}$ , les courbes  $dP_{R0}(r_c)$  sont presque confondues. Lorsque  $\langle \sigma_I \rangle$  et  $\chi$  augmentent, l'effet de  $T$  sur les distributions de  $dP_{R0}$  est moins marqué car les valeurs de  $\sigma_I$  sont assez élevées pour permettre l'amorçage de la rupture sur les carbures de petite taille.

### b) Etude à $T$ fixée : effet de $\langle \varepsilon_{eq} \rangle$ et $\chi$ sur l'évolution de $dP_{R0}(r_c)$

Le paragraphe précédent ne permet pas de conclure quant à l'effet de la déformation plastique équivalente  $\langle \varepsilon_{eq}^p \rangle$  sur la probabilité d'amorçage des défauts  $dP_{R0}(r_c)$  et sur la probabilité de rupture  $P_{R0}$  du volume élémentaire. Nous avons étudié l'évolution de  $dP_{R0}$  et  $P_{R0}$  en fonction de  $\langle \varepsilon_{eq}^p \rangle$  et  $\chi$ . Or, la fonction de distribution des valeurs de  $\sigma_I$  est écrite en contraintes : elle dépend de  $\langle \sigma_I \rangle$  et  $\langle \sigma_{mises} \rangle$  (équation (VI.67)).

Si on se donne  $\langle \varepsilon_{eq}^p \rangle$ , la valeur de  $\langle \sigma_{mises} \rangle$  peut être calculée à partir des lois de type Hollomon identifiées à partir des essais mécaniques dans le chapitre III :

$$\langle \sigma_{mises} \rangle = K \langle \varepsilon_{eq}^p \rangle^n \quad (\text{VI.75})$$

Comme le niveau de triaxialité est lui aussi imposé, on montre qu'en déformations planes,  $\langle \sigma_I \rangle$  peut être déduit de  $\langle \sigma_{mises} \rangle$  à partir de l'équation (VI.69) :

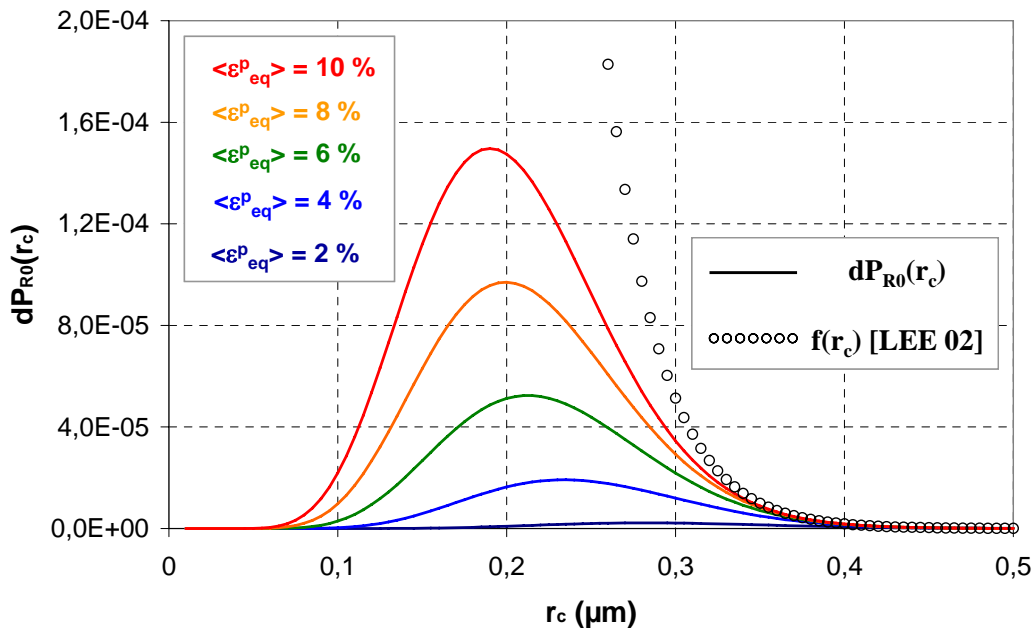
$$\langle \sigma_I \rangle = \frac{2k}{\sqrt{3}(k-1)} \langle \sigma_{mises} \rangle \quad \text{avec} \quad k = \frac{\chi\sqrt{3}+1}{\chi\sqrt{3}-1} \quad (\text{VI.76})$$

En utilisant les équations (VI.77) et (VI.78), il est donc possible de calculer les valeurs  $\langle \sigma_I \rangle$  et  $\langle \sigma_{mises} \rangle$  qui correspondent à des niveaux de  $\langle \mathcal{E}_{eq}^p \rangle$  et  $\chi$  imposés. En tout, pour chaque valeur de  $T$  et  $\chi$ , 5 niveaux de déformation sont étudiés :  $\langle \mathcal{E}_{eq}^p \rangle = 2\%$ ,  $4\%$ ,  $6\%$ ,  $8\%$  et  $10\%$ . En tout, quatre valeurs de température et deux niveaux de triaxialité sont étudiées :  $T = -60^\circ\text{C}$ ,  $-90^\circ\text{C}$ ,  $-150^\circ\text{C}$  et  $-196^\circ\text{C}$  avec  $\chi = 1,5$  et  $2,5$ .

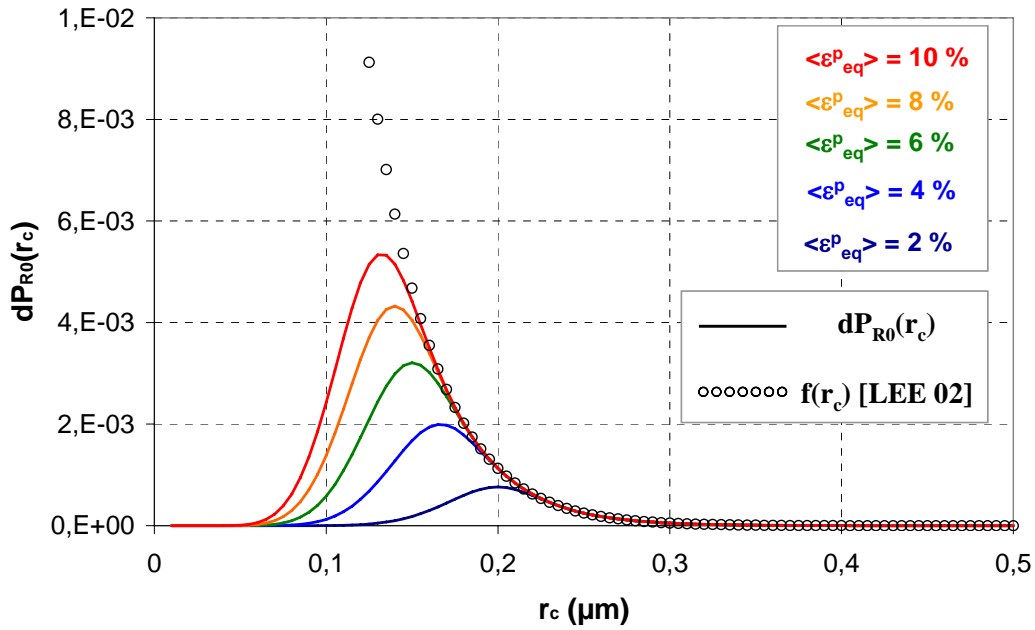
Les figures VI.16 et VI.17 présentent l'évolution des courbes  $dP_{R0}$  en fonction de  $r_c$  à  $T = -60^\circ\text{C}$  avec respectivement  $\chi = 1,5$  et  $2,5$ .

On peut faire les remarques suivantes :

- la probabilité d'amorçage  $dP_{R0}$  augmente lorsque la déformation augmente.
- De plus, on observe un étalement des courbes  $dP_{R0} = f(r_c)$  avec la déformation, plus prononcé pour  $\chi = 1,5$  que  $2,5$  : l'amorçage du clivage peut concerner les carbures de plus petite taille. La nocivité des 'petits' carbures est d'autant plus grande que la déformation est élevée. Rappelons que notre approche ne prend pas en compte la 'désactivation' des sites potentiels de clivage avec la déformation [BOR05\_I].
- On note également l'aspect de 'courbe en cloche' de la fonction  $dP_{R0} = f(r_c)$  d'autant plus marqué que  $T$  est élevée ou que  $\chi$  est faible. Ces courbes s'écartent nettement de la fonction de densité de tailles de défauts  $f(r_c)$  : cela signifie que la probabilité d'amorçage du clivage sur un défaut est grandement dépendante des dispersions de  $\sigma_I$  à l'échelle du volume  $V_0$ .

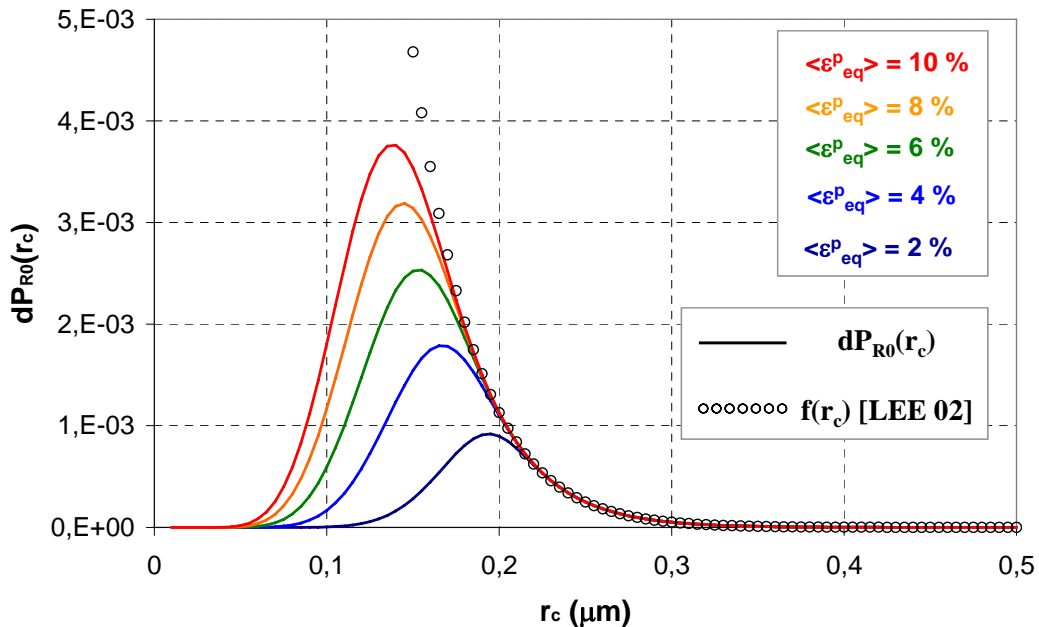


**Fig. VI.16 :** Evolution de  $dP_{R0}(r_c)$  en fonction de  $\langle \mathcal{E}_{eq}^p \rangle$  pour  $\{T = -60^\circ\text{C}, \chi = 1,5\}$  et comparaison avec la fonction de distribution de tailles de carbures  $f(r_c)$

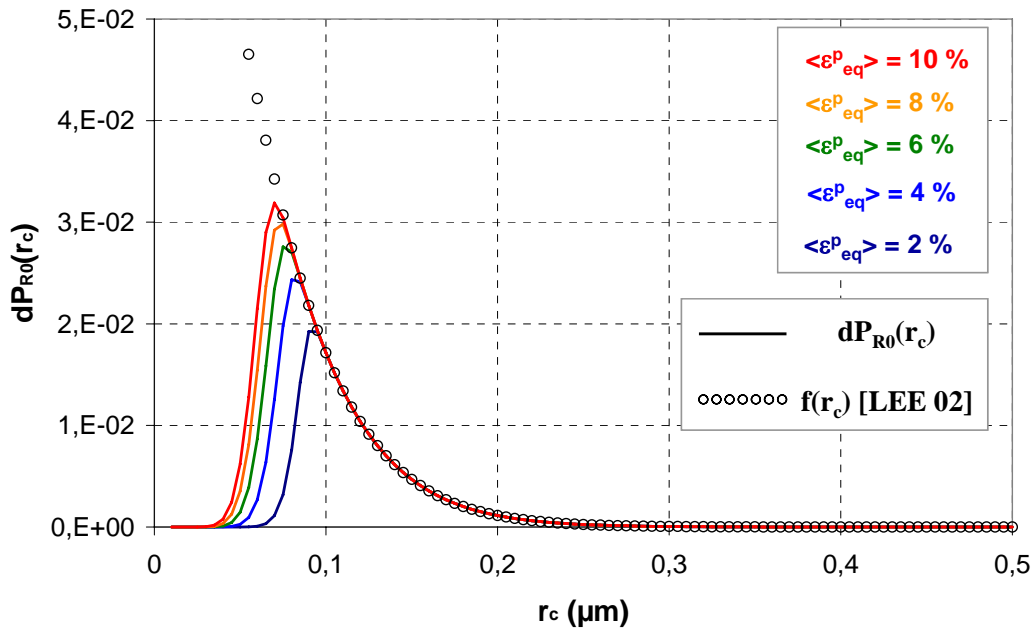


**Fig. VI.17 :** Evolution de  $dP_{R0}(r_c)$  en fonction de  $\langle \mathcal{E}_{eq}^p \rangle$  pour  $\{T = -60^\circ\text{C}, \chi = 2,5\}$  comparaison avec la fonction de distribution de tailles de carbures  $f(r_c)$

Les figures VI.18 et VI.19 ( $T = -196^\circ\text{C}$ ) viennent confirmer les remarques déjà formulées pour  $T = -60^\circ\text{C}$ .



**Fig. VI.18 :** Evolution de  $dP_{R0}(r_c)$  en fonction de  $\langle \mathcal{E}_{eq}^p \rangle$  pour  $\{T = -196^\circ\text{C}, \chi = 1,5\}$  et comparaison avec la fonction de distribution de tailles de carbures  $f(r_c)$



**Fig. VI.19 :** Evolution de  $dP_{R0}(r_c)$  en fonction de  $\langle \varepsilon_{eq}^p \rangle$  pour  $\{T = -196^\circ\text{C}, \chi = 2,5\}$  et comparaison avec la fonction de distribution de tailles de carbures  $f(r_c)$

Pour  $\{T = -196^\circ\text{C}, \chi = 2,5\}$ , l'allure des courbes  $dP_{R0} = f(r_c)$  est peu affectée par la déformation. De plus, ces courbes sont presque confondues avec la fonction densité de tailles de carbures  $f(r_c)$  : au dessus d'une taille de défaut critique (de l'ordre de 0,05 à 0,1  $\mu\text{m}$ ), la probabilité d'amorçage du défaut vaut 1. Lorsque les contraintes sont très élevées, l'effet de la distribution des tailles de défauts prime sur celui des hétérogénéités de contraintes locales. Dans ce cas de figure, la déformation moyenne  $\langle \varepsilon_{peq} \rangle$  n'influe pas de manière significative sur les valeurs de  $dP_{R0}$ .

### c) Etude à $\langle \varepsilon_{eq} \rangle$ fixée : effet de $T$ et $\chi$ sur l'évolution de $dP_{R0}(r_c)$ et $P_{R0}$

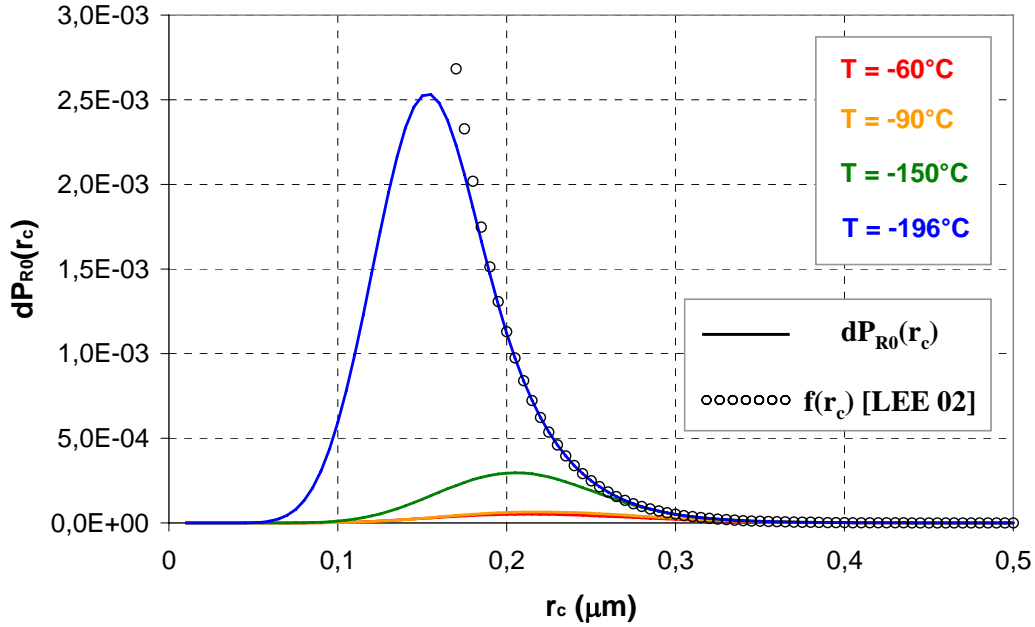
Dans ce paragraphe, nous étudions l'influence de  $T$  et  $\chi$  sur l'évolution des courbes  $dP_{R0} = f(r_c)$  à iso-déformation plastique équivalente.  $\langle \varepsilon_{eq}^p \rangle$  est fixée à 6 %, 4 valeurs de température sont étudiées :  $T = -60^\circ\text{C}, -90^\circ\text{C}, -150^\circ\text{C}$  et  $-196^\circ\text{C}$ .

Les figures VI.20 et VI.21 représentent les courbes  $dP_{R0} = f(r_c)$  pour  $\chi = 1,5$  et 2,5 respectivement.

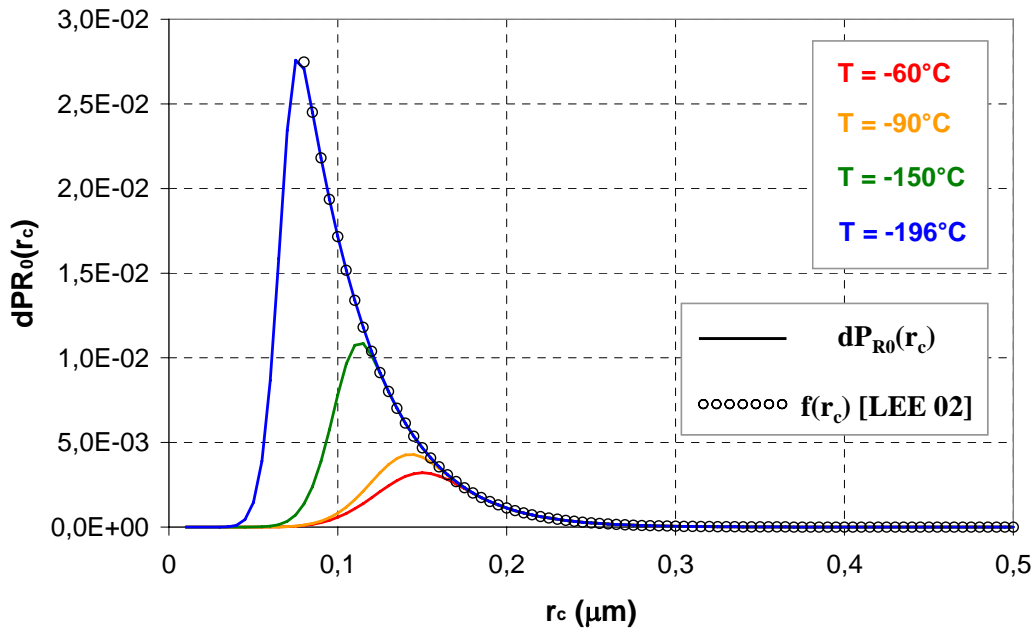
Les résultats montrent que, pour  $\langle \varepsilon_{eq}^p \rangle = 6\%$ , la diminution de la température a pour effet d'augmenter les valeurs de  $dP_{R0}$ , et ce, pour toutes les tailles de carbures.

Ces résultats ne sont pas en contradiction avec ceux obtenus à  $\langle \sigma_I \rangle$  fixée (cf. paragraphe VI.D.2.a). Ici, la déformation moyenne est imposée, et les valeurs de  $\langle \sigma_I \rangle$  dans le volume  $V_0$  augmentent lorsque  $T$  diminue.

Par ailleurs, les carbures de petite taille sont d'autant plus nocifs que la température est faible : cet effet peut également être expliqué par l'augmentation de  $\langle \sigma_I \rangle$  lorsque  $T$  diminue. Par ailleurs, l'effet de  $T$  sur les courbes  $dP_{R0} = f(r_c)$  semble plus prononcé pour  $\chi = 1,5$  (figure VI.20) que pour  $\chi = 2,5$  (figure VI.21).



**Fig. VI.20 :** Evolution de  $dP_{R0}(r_c)$  en fonction de  $T$  pour  $\{\langle \mathcal{E}_{eq}^p \rangle = 6\% , \chi = 1,5\}$  et comparaison avec la fonction de distribution de tailles de carbures  $f(r_c)$



**Fig. VI.21 :** Evolution de  $dP_{R0}(r_c)$  en fonction de  $T$  pour  $\{\langle \mathcal{E}_{eq}^p \rangle = 6\% , \chi = 2,5\}$  et comparaison avec la fonction de distribution de tailles de carbures  $f(r_c)$

### VI.D.3 Evolution de $P_{R0}$ en fonction de $\langle \sigma_I \rangle$ , $\langle \varepsilon_{eq} \rangle$ et $T$ : comparaison des résultats avec ceux du modèle de Beremin

La relation (VI.74) permet de calculer la probabilité de rupture  $P_{R0}$  dans le volume élémentaire  $V_0$ . L'équation (VI.72) permet d'exprimer  $P_{R0}$  en fonction de  $\langle \sigma_I \rangle$ , de  $\langle \sigma_{mises} \rangle$  et de  $T$ .

$$P_{R0} = \int_{r_c = a/2}^{\infty} dP_{R0}(r_c, \langle \sigma_I \rangle, \langle \sigma_{mises} \rangle, T) dr_c \quad (VI.77)$$

Pour écrire un critère d'approche locale de la rupture, il faut éliminer la variable  $\langle \sigma_{mises} \rangle$  et exprimer  $P_{R0}$  en fonction de  $\langle \sigma_I \rangle$  et  $T$  et  $\chi$ . L'équation VI.76 établit une relation de proportionnalité entre  $\langle \sigma_I \rangle$  et  $\langle \sigma_{mises} \rangle$ . Par conséquent, dans l'expression de  $P(\sigma_I > \sigma_c(r_c))$ ,  $\langle \sigma_{mises} \rangle$  peut être remplacé par  $\langle \sigma_I \rangle$ .

$$P_{R0}(\langle \sigma_I \rangle, T, \chi) = \int_{a/2}^{\infty} f(r_c) \left[ 1 - \exp \left[ - \exp \left( - \frac{\sigma_c(r_c) - \langle \sigma_I \rangle}{\alpha'(T, \chi) \langle \sigma_I \rangle + \beta(T)} + \Gamma'(I) \right) \right] \right] dr_c \quad (VI.78)$$

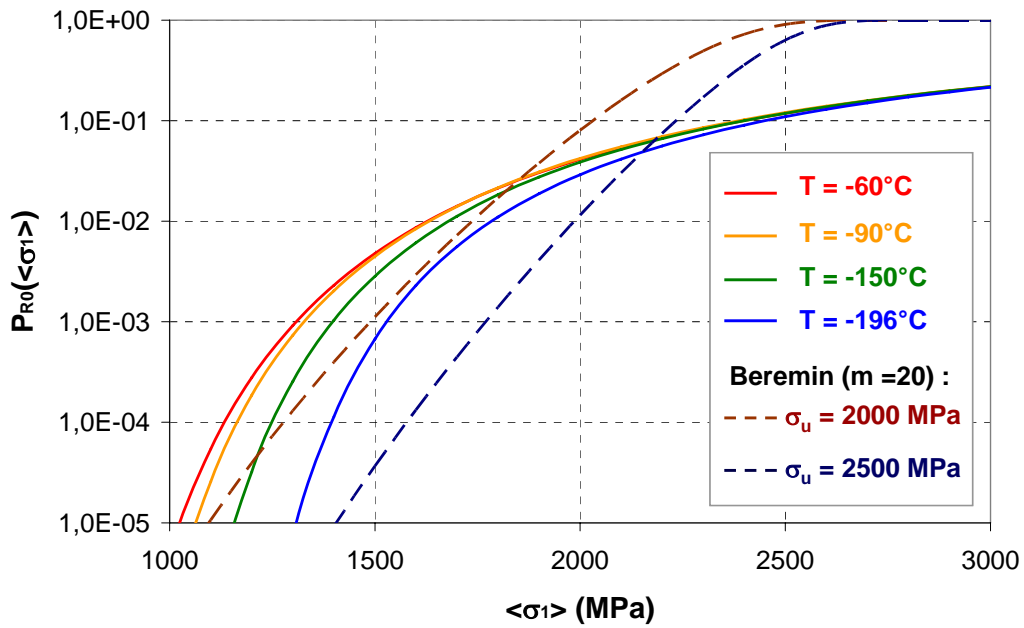
La constante  $\alpha'(T, \chi)$  étant définie par :

$$\alpha'(T, \chi) = \frac{\sqrt{3}(k-1)}{2k} \alpha(T) \quad \text{avec} \quad k = \frac{\chi\sqrt{3}+1}{\chi\sqrt{3}-1} \quad (VI.79)$$

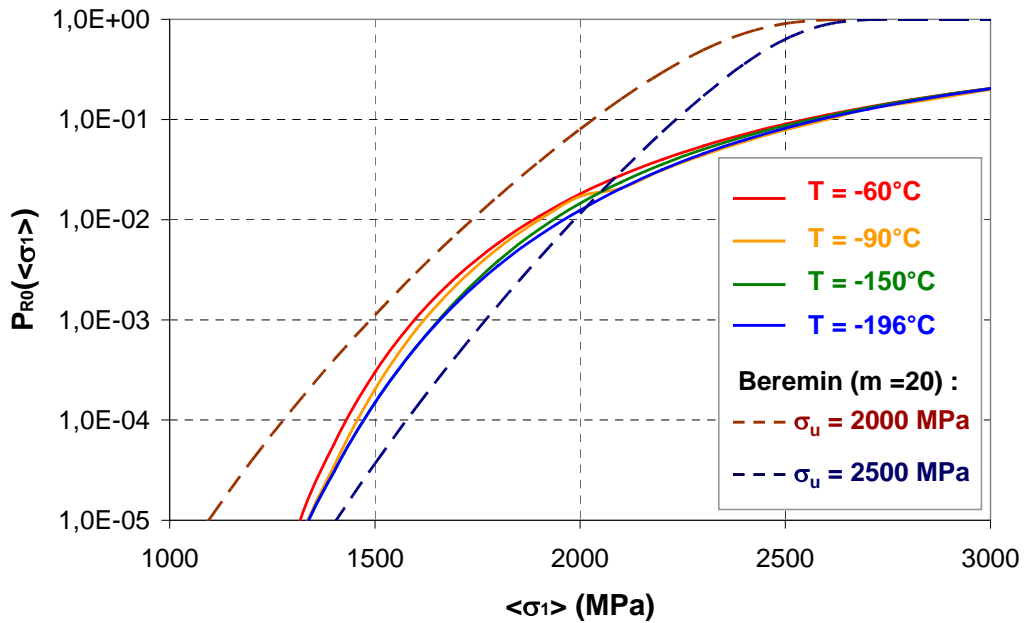
L'équation (VI.78) définit bien un modèle d'approche locale de la rupture par clivage. Comme dans le modèle de Beremin, l'expression de  $P_{R0}$  dépend de  $\langle \sigma_I \rangle$  et de la température  $T$ . Cependant, notre approche fait également intervenir une dépendance en triaxialité moyenne dans le volume  $V_0$ , ce qui n'est pas le cas du modèle de Beremin. De plus, l'influence de la distribution des tailles de défauts est prise en compte explicitement à travers la fonction densité  $f(r_c)$ .

#### a) Evolution de $P_{R0}$ en fonction de $\langle \sigma_I \rangle$ : comparaison avec le modèle de Beremin

Dans un premier temps, nous avons comparé l'évolution de la probabilité  $P_{R0}$  prédite par notre modèle avec celle du modèle de Beremin pour  $\sigma_u = 2000$  et  $2500$  MPa,  $m$  étant fixé à 20. Les figures VI.22 et VI.23 montrent l'évolution de  $P_{R0}$  en fonction de  $\langle \sigma_I \rangle$ , pour  $\chi = 1,5$  et  $2,5$ . Les valeurs de  $P_{R0}$  sont tracées en échelle logarithmique, ce qui permet de balayer un large spectre de valeurs de  $P_{R0}$ .



**Fig. VI.22 :** Courbes  $P_{R0} = f(\langle \sigma_I \rangle)$  pour différentes valeurs de  $T$  et  $\chi = 1,5$ . Comparaison avec le modèle de Beremin (échelle logarithmique)



**Fig. VI.23 :** Courbes  $P_{R0} = f(\langle \sigma_I \rangle)$  pour différentes valeurs de  $T$  et  $\chi = 2,5$ . Comparaison avec le modèle de Beremin (échelle logarithmique)

Les figures VI.22 et VI.23 montrent que :

- Quelles que soient les valeurs de  $T$  et  $\chi$ ,  $P_{R0}$  est une fonction croissante de  $\langle \sigma_I \rangle$ .



- D'autre part, les valeurs de  $P_{R0}$  augmentent avec  $T$ . Si ce résultat semble à priori surprenant, on peut supposer qu'à  $T = -60^\circ\text{C}$ , la valeur de  $P_{R0}$  est plus élevée qu'à  $T = -196^\circ\text{C}$ , mais au prix d'une déformation plastique  $\langle \mathcal{E}_{eq}^p \rangle$  beaucoup plus élevée. A ce titre, il serait intéressant de comparer les valeurs de  $P_{R0}$  à  $\langle \mathcal{E}_{eq}^p \rangle$  fixée plutôt qu'à  $\langle \sigma_I \rangle$  fixée. Dans les modèles classiques d'approche locale de la rupture et à  $\langle \sigma_I \rangle$  fixée,  $P_{R0}$  est pris comme une fonction décroissante de  $T$  [HAU02]. Notre modèle est en désaccord avec cette dépendance.
- L'effet de  $T$  sur les courbes  $P_{R0} = f(\langle \sigma_I \rangle)$  est plus sensible dans le cas de figure  $\chi = 1,5$  que pour  $\chi = 2,5$ . On peut également y voir un effet de la déformation plastique, d'autant plus élevée que la triaxialité est faible.
- Notre modèle d'approche locale conduit à des valeurs assez proches de celui de Beremin pour les faibles valeurs de  $\langle \sigma_I \rangle$  (ou de  $P_{R0}$ ). Cependant, notre modèle s'écarte sensiblement du modèle de Beremin pour les valeurs de  $\langle \sigma_I \rangle$  les plus élevées. Les deux modèles d'approche locale s'accordent tant que  $P_{R0} < 10^{-2}$  (pour  $\chi = 1,5$ ) ou  $P_{R0} < 10^{-1}$  (pour  $\chi = 2,5$ ). Ce domaine d'accord semble à première vue restreint, mais il faut souligner qu'en vertu de l'hypothèse de 'maillon le plus faible', de faibles valeurs de  $P_{R0}$  correspondent à un état rompu à l'échelle d'une éprouvette CT. Ce dernier point fait l'objet du paragraphe suivant.

Remarque :

Dans une éprouvette CT, si on considère que la taille de volume plastique  $V_p$  au centre de l'éprouvette (déformations planes) est de l'ordre de  $(500\mu\text{m})^3$ , cela correspond approximativement à 1000 volumes élémentaires. Si on applique un critère de type maillon le plus faible, la probabilité de rupture de l'éprouvette vaut :

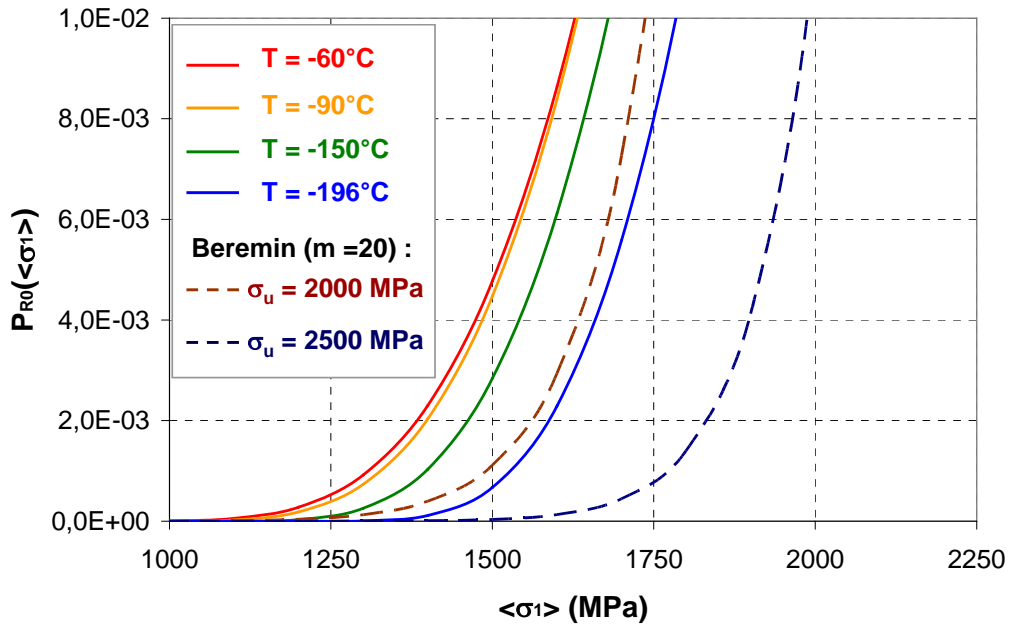
$$P_R = 1 - (1 - P_{R0})^N \quad (\text{VI.80})$$

Inversement, on peut exprimer  $P_{R0}$  en fonction de  $P_R$  :

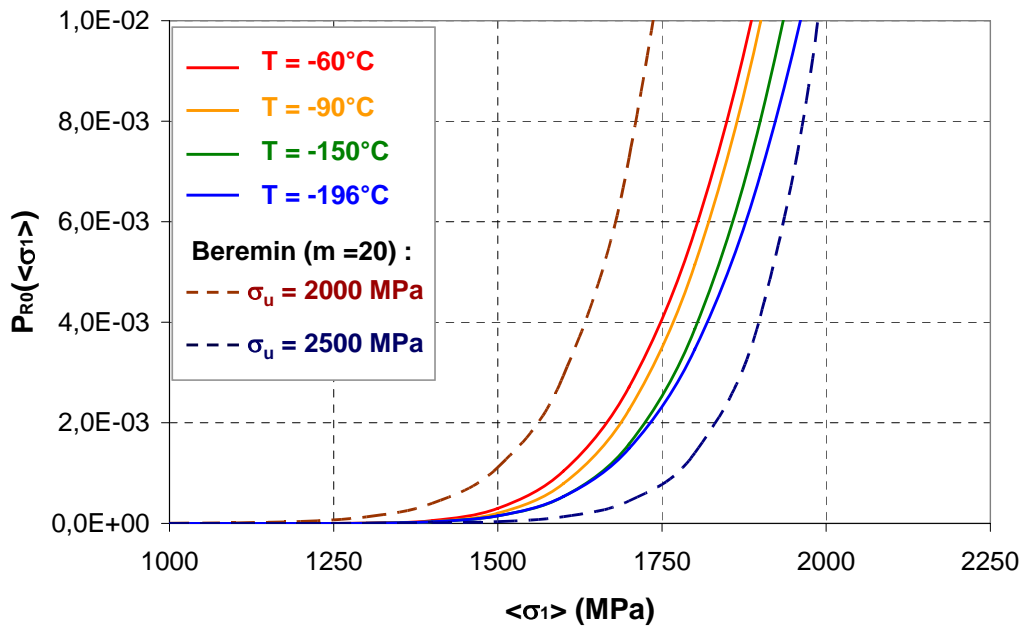
$$P_{R0} = 1 - (1 - P_R)^{1/N} \quad (\text{VI.81})$$

Une probabilité de rupture de l'éprouvette de 0,99 correspond à une valeur de  $P_{R0}$  de  $4,6 \cdot 10^{-3}$  : le domaine dans lequel le modèle d'approche local n'est pas en accord avec celui de Beremin correspondrait ainsi à un état rompu dans une éprouvette CT.

Les figures VI.24 et VI.25 permettent de comparer les valeurs de  $P_{R0}$  données par le modèle avec celles du modèle de Beremin, mais en tenant compte des remarques faites précédemment : on constate que lorsque la probabilité de rupture du maillon est inférieure à  $10^{-2}$ , les courbes  $P_{R0} = f(\langle \sigma_I \rangle)$  sont en accord avec des valeurs de  $m$  de l'ordre de 20.



**Fig. VI.24 :** Courbes  $P_{R0} = f(\langle \sigma_I \rangle)$  pour différentes valeurs de  $T$  ( $\chi = 1,5$ ). Comparaison avec le modèle de Beremin

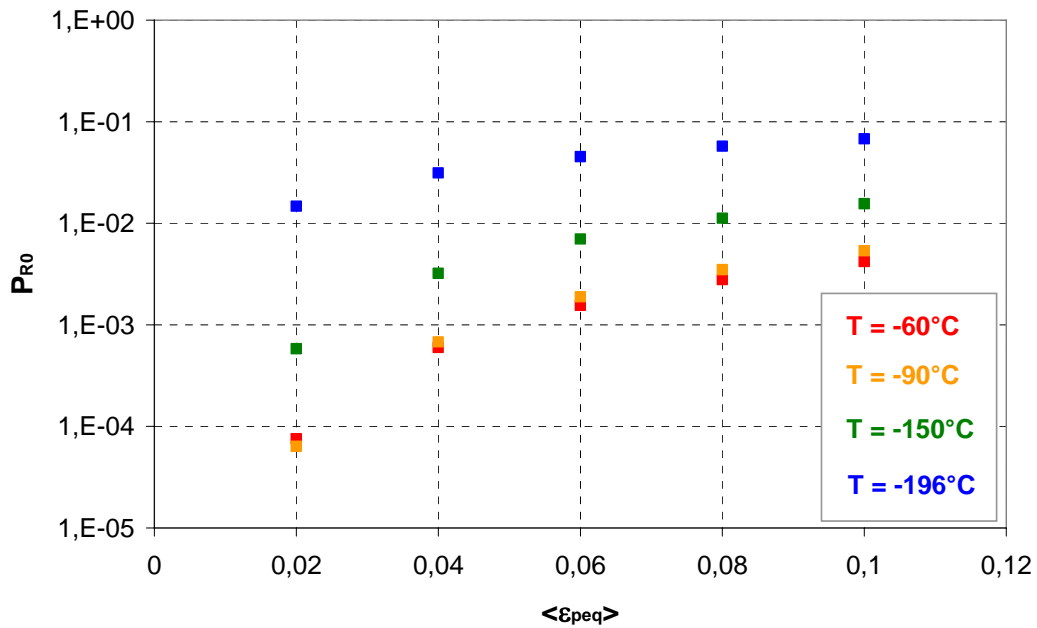


**Fig. VI.25 :** Courbes  $P_{R0} = f(\langle \sigma_I \rangle)$  pour différentes valeurs de  $T$  ( $\chi = 2,5$ ). Comparaison avec le modèle de Beremin

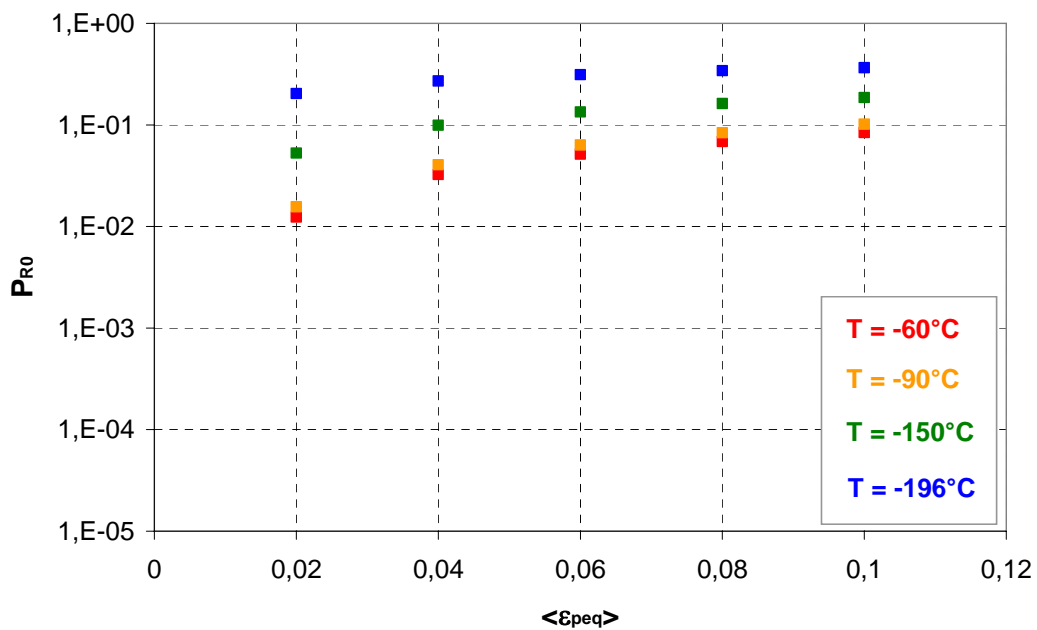
L'expression (VI.78) définit un modèle d'approche locale de la rupture qui est fonction de la distribution des tailles de carbures et des hétérogénéités mécaniques. Les figures VI.24 et VI.25 montrent clairement un effet de la triaxialité et de la température sur les valeurs de  $P_{R0}$ . Il reste à étudier plus précisément l'effet de la déformation plastique équivalente. A déformation fixée, il est notamment nécessaire de caractériser l'influence de la température et de la triaxialité sur les valeurs de  $P_{R0}$ .

**b) Effet de la déformation équivalente  $\langle \varepsilon_{eq} \rangle$  sur la probabilité de rupture  $P_{R0}$  du volume élémentaire**

On applique la même démarche que pour l'étude des courbes  $dP_{R0} = f(r_c)$  dans le paragraphe VI.D.2.b. Pour un niveau de triaxialité donné ( $\chi = 1,5$  ou  $2,5$ ), on détermine les valeurs de  $\langle \sigma_I \rangle$  de  $\langle \sigma_{mises} \rangle$  correspondant à plusieurs états de déformation plastique équivalente :  $\langle \varepsilon_{peq} \rangle = 2\%$ ,  $4\%$ ,  $6\%$ ,  $8\%$  et  $10\%$ . On peut ainsi étudier l'influence de la déformation sur la probabilité de rupture du volume élémentaire. Les figures VI.26 et VI.27 présentent l'évolution de  $P_{R0}$  en fonction de  $\langle \varepsilon_{peq} \rangle$  pour  $\chi = 1,5$  et  $2,5$  respectivement



**Fig. VI.26 :** Evolution de  $P_{R0}$  en fonction de  $\langle \varepsilon_{peq} \rangle$  pour  $\chi = 1,5$



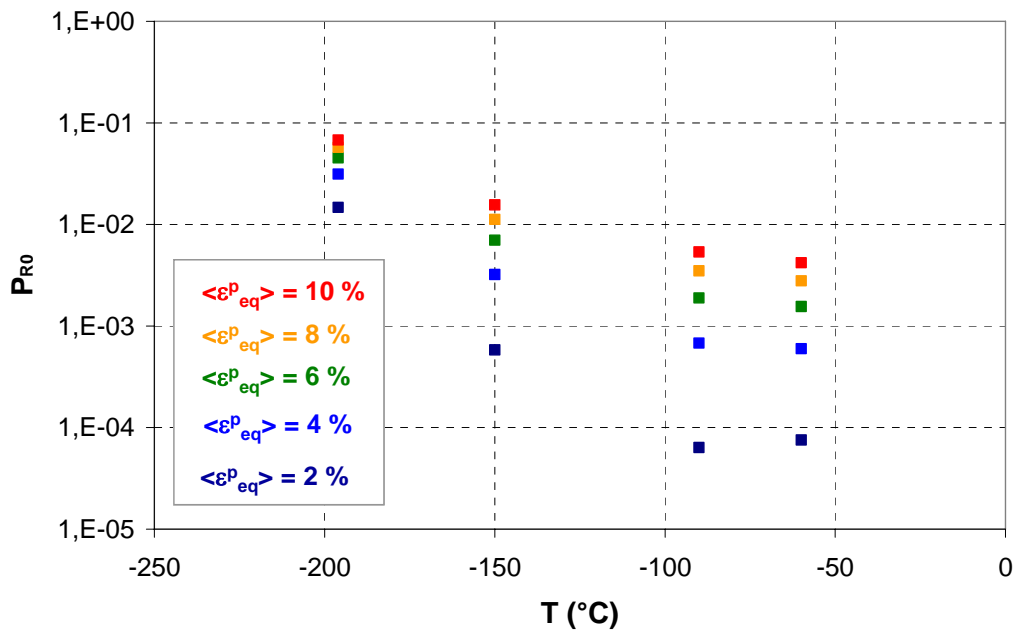
**Fig. VI.27 :** Evolution de  $P_{R0}$  en fonction de  $\langle \varepsilon_{peq} \rangle$  pour  $\chi = 2,5$

Les figures VI.26 et VI.27 amènent plusieurs remarques :

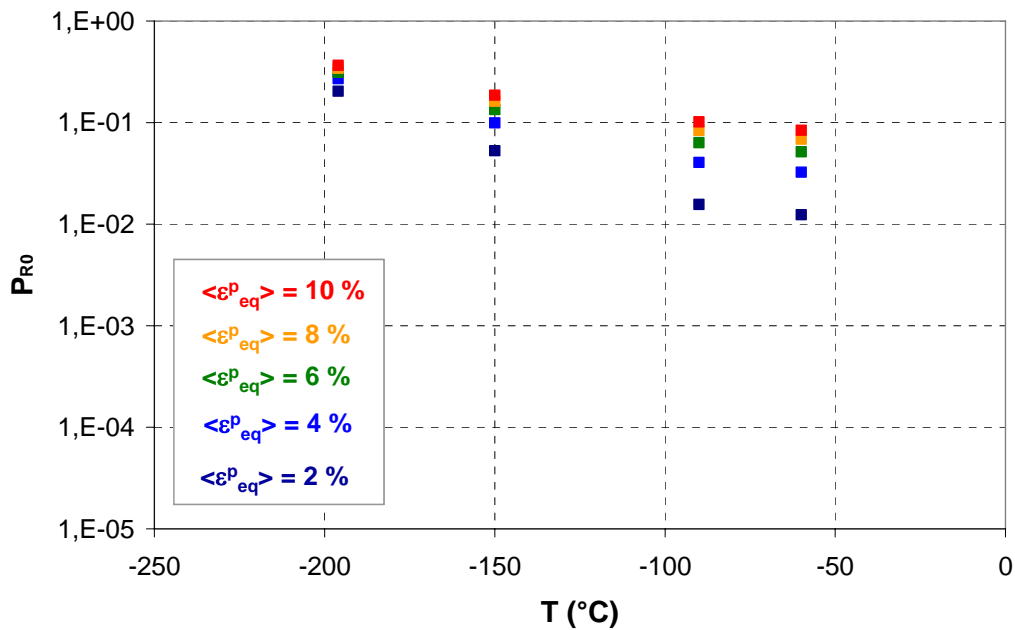
- La probabilité de rupture du volume  $V_0$  est une fonction croissante de la déformation : l'effet de la déformation est d'autant plus élevé que la température est élevée. On peut formuler l'interprétation suivante : à  $T = -196^\circ\text{C}$ , les contraintes sont peu dispersées et suffisamment élevées pour permettre l'amorçage du clivage sans déformation préalable, tandis qu'à  $T = -60^\circ\text{C}$ , la contrainte de clivage n'est atteinte qu'après déformation.
- Les valeurs de  $P_{R0}$  sont plus élevées dans le cas de figure  $\chi = 2,5$  que pour  $\chi = 1,5$ . Même dès  $\langle \varepsilon_{peq} \rangle = 2\%$ , les valeurs de  $P_{R0}$  excèdent  $10^{-2}$ , ce qui correspond à la rupture à l'échelle macroscopique. D'autre part, l'effet de la déformation semble plus prononcé lorsque  $\chi = 1,5$  que pour  $\chi = 2,5$ . On peut là encore y voir un effet de la déformation plastique.
- Enfin, à  $\langle \varepsilon_{peq} \rangle$  fixée les valeurs de  $P_{R0}$  décroissent avec la température. A iso-déformation plastique, la rupture est d'autant plus probable que la température est faible. A iso-contrainte  $\langle \sigma_l \rangle$ , on constate le phénomène inverse (cf. paragraphe VI.D.3.a)

**c) Effet de la température  $T$  sur la probabilité de rupture  $P_{R0}$  du volume élémentaire**

A iso-déformation plastique, il est également possible d'étudier l'effet de la température sur la rupture du maillon élémentaire. Les figures VI.28 et VI.29 présentent l'évolution de  $P_{R0}$  en fonction de  $T$  à différents niveaux de  $\langle \varepsilon_{peq} \rangle$ , et pour  $\chi = 1,5$  et  $2,5$  respectivement.



**Fig. VI.28 :** Evolution de  $P_{R0}$  en fonction de  $T$  pour  $\chi = 1,5$



**Fig. VI.29 :** Evolution de  $P_{R0}$  en fonction de  $T$  pour  $\chi = 2,5$

Ces figures permettent de préciser les remarques déjà formulées dans le paragraphe précédent :

- Les résultats montrent que  $P_{R0}$  est bien une fonction décroissante de la température  $T$ .
- L'effet de  $T$  sur la probabilité de rupture  $P_{R0}$  est plus marqué pour  $\chi = 1,5$  que pour  $\chi = 2,5$ .
- L'effet de la température est d'autant plus prononcé que  $\langle \varepsilon_{peq} \rangle$  est faible.

En définitive, notre modèle d'approche locale de la rupture présente les caractéristiques suivantes :

- Le modèle prend en compte l'effet des hétérogénéités de  $\sigma_l$  à l'échelle du volume élémentaire
- La fonction de distribution des tailles de défauts est introduite de façon explicite.
- La probabilité de rupture du maillon  $P_{R0}$  dépend non seulement de  $\sigma_l$ , mais également de  $T$  et de  $\chi$ . La dépendance en température repose uniquement sur la description des champs mécaniques locaux.
- Dans un 'domaine d'intérêt' ( $P_{R0} < 10^{-2}$ ), ce modèle est en accord avec les résultats donnés par celui de Beremin. Rappelons néanmoins que le modèle de Beremin est identifié à l'échelle de l'éprouvette et non pas à celle du volume élémentaire.

## Conclusion du chapitre VI

### Etude bibliographique des mécanismes de la rupture par clivage :

- Mécanisme élémentaire de rupture par clivage : les différents aspects physiques de la rupture par clivage transgranulaire sont passés en revue. Le mécanisme de rupture par clivage se déroule en trois étapes :
  - germination d'une population de micro-défauts ;
  - propagation d'une micro-fissure de clivage à partir d'un micro-défaut ;
  - franchissement des barrières microstructurales.

Dans les aciers faiblement alliés, les différents auteurs identifient la propagation d'une microfissure de clivage à partir d'un défaut amorcé au cours de la déformation comme étape critique du mécanisme de rupture par clivage [BOR05], [MAT06]. Le critère associé à ce mécanisme de base est le critère de Griffith [GRI20].

- Rôle des défauts et de la microstructure : Dans les aciers de cuve, la germination des défauts se produit en général à partir de particules de seconde phase. Certains auteurs mettent en avant la présence de MnS près des sites d'amorçage du clivage [ROS98] [CAR99]. D'autres identifient les carbures comme responsables de la propagation du clivage. Les barrières microstructurales peuvent également influencer sur la propagation des micro-fissures [BRO78].

### Revue des modèles d'approche locale de la rupture fragile par clivage :

Ces modèles supposent la rupture par propagation instable du clivage à partir d'un micro-défaut et ils utilisent un critère de type Griffith. Ces modèles introduisent une notion de volume élémentaire  $V_0$  [RKR73] : il y a rupture de la structure si la contrainte atteint une valeur critique dans le volume  $V_0$ .

- Modèle de Beremin [BER83] : Le modèle de Beremin a servi de référence à la plupart des modélisations d'approche locale développées par la suite. L'introduction d'une distribution de tailles de défauts pré-existants permet d'introduire une description probabiliste de la rupture. Le modèle de Beremin permet de décrire la dispersion des valeurs de ténacité et résilience dans les aciers de cuve.
- Autres modèles d'approche locale de la rupture : Des développements ont été entrepris pour prendre en compte l'effet de la déformation et de la triaxialité [BER83], de la température et de la germination des micro-défauts [BOR05]. Cependant, ces approches n'intègrent pas explicitement toutes les données de l'échelle microscopique, comme les hétérogénéités mécaniques ou la répartition des défauts dans la microstructure.
- Perspectives d'amélioration : Afin de palier aux limitations des modèles d'approche locale, Mathieu [MAT06] propose une approche micromécanique du comportement à l'échelle du volume élémentaire  $V_0$ , couplée à un critère de propagation de type Griffith.

*Il met en évidence la nécessité de prise en compte des hétérogénéités mécaniques pour prédire la dispersion de contraintes à rupture, ainsi que l'effet de la triaxialité sur ces dispersions.*

**Modèle d'approche locale de la rupture basé sur les hétérogénéités de  $\sigma_1$  :**

*L'objectif de ce modèle d'approche locale est de montrer dans quelle mesure les hétérogénéités de  $\sigma_1$  peuvent expliquer les dispersions de contrainte à rupture à l'échelle du volume  $V_0$  dans l'acier de cuve bainitique.*

- *Formulation du modèle : La propagation instable d'une micro-fissure de clivage à partir des carbures, constitue l'événement critique de la rupture par clivage. La taille de carbures est supposée homogène. Par le critère de Griffith, on définit donc une contrainte critique 'déterministe'  $\sigma_c$  de propagation du clivage. On suppose qu'il y a rupture du volume  $V_0$  dès lors que la contrainte  $\sigma_c$  est atteinte dans un paquet de lattes bainitique. La probabilité  $P(\sigma > \sigma_c)$  est calculée à partir de la fonction de distribution des valeurs de  $\sigma_1$  identifiée dans le **chapitre V**.*
- *Résultats : L'application de ce modèle permet de mettre en évidence l'effet de plusieurs paramètres (température, triaxialité) sur la probabilité de rupture  $P_{R0}$  dans le volume élémentaire. De plus, pour des niveaux de température élevés ou des triaxialités faibles, ce modèle reproduit les dispersions de contrainte à rupture données dans la littérature.*
- *Limitations : Pour des niveaux de triaxialité élevés ou des températures basses, ce modèle conduit à des dispersions de contrainte à rupture beaucoup plus faibles que celles prédites dans la littérature. Lorsque les dispersions de  $\sigma_1$  sont faibles, elles ne suffisent plus à expliquer la dispersion de contraintes à rupture : la prise en compte des distributions de tailles de défauts est alors indispensable.*

**Modèle d'approche locale de la rupture intégrant la distribution des tailles de carbures et les hétérogénéités de  $\sigma_1$  :**

- *Formulation du modèle : Pour chaque carbure de taille  $r_c$ , le critère de Griffith permet de calculer une contrainte critique de clivage  $\sigma_c(r_c)$ . La probabilité d'amorçage du clivage  $dP_{R0}(r_c)$  sur un carbure de taille  $r_c$  est calculée à partir de la fonction densité de tailles de carbures  $f(r_c)$  et de la fonction de distribution de  $\sigma_1$   $P(\sigma_1 > \sigma_c)$  :*

$$dP_{R0}(r_c) = f(r_c) \cdot P(\sigma_1 > \sigma_c)$$

*Le calcul de la probabilité de rupture  $P_{R0}$  se fait par intégration de  $dP_{R0}(r_c)$  sur toutes les tailles de carbures rencontrées dans le volume  $V_0$  (supposé représentatif de la distribution des carbures) :*

$$P_{R0} = \int_{a/2}^{\infty} dP_{R0}(r_c) \cdot dr_c$$

- Résultats : La prise en compte de la distribution de tailles de défauts conduit à des dispersions de contrainte à rupture en accord avec celles prédites par le modèle de Beremin ( $\sigma_u = 2000$  à  $2500$  MPa et  $m = 20$ ). Aux températures les plus basses, les dispersions sont en accord avec celles données par le modèle de Beremin. On note par contre que l'accord n'est plus valable au-delà de  $P_{R0} \approx 10^{-2}$  (état rompu à l'échelle macroscopique).

Par ailleurs, l'application de ce modèle permet de mettre en évidence l'effet de plusieurs paramètres (température, triaxialité, déformation) sur l'évolution de  $P_{R0}$ . A déformation fixée, on montre par exemple que  $P_{R0}$  est une fonction décroissante de la température, et croissante de la triaxialité. On retrouve pourtant le résultat inverse en raisonnant à  $\langle \sigma_I \rangle$  fixée. Les valeurs de  $P_{R0}$  augmentent avec la déformation et ce d'autant plus fortement que  $T$  est élevée. Dans notre modèle, la dépendance en température et en triaxialité de la probabilité  $P_{R0}$  résulte uniquement de la prise en compte des distributions de  $\sigma_I$ . Cette dépendance n'est pas recalée de manière phénoménologique d'après des essais de résilience ou de ténacité. Il s'agit d'un des intérêts majeurs de ce type d'approche par rapport à des modèles d'approche locale 'classiques'.

Perspectives : On dispose d'un modèle d'approche locale relativement simple à mettre en œuvre et intégrant un grand nombre de données issues de l'échelle microscopique (dispersions de tailles de carbures, hétérogénéités de  $\sigma_I$ ). Il s'agit pour l'instant d'un modèle aidant à la compréhension des différents mécanismes à l'origine des dispersions de contrainte à rupture, mais en aucun cas d'un outil prédictif. Il serait intéressant de confronter les dispersions de ténacité mesurées expérimentalement sur des éprouvettes CT à celles obtenues par le modèle.



## Références bibliographiques

[BEL04] BELTZ (G. E.), MACHOVA (A.) – *Effect of T stress on dislocation emission in iron*. Scripta Materallia, vol. n°50, pp. 483-487, 2004.

[BER83] BEREMIN (F.M.) – *A local criterion for cleavage fracture for a nuclear pressure vessel steel*. Metallurgical Transactions A, vol. n°14, pp. 2277-2287, 1983.

[BIG58] BIGGS (W.D.), PRATT (P.L.) – *The deformation and fracture of alpha-iron at low temperatures*. Acta metallurgica, vol. n°6, pp 694-703, 1958.

[BLO04] BLONSKI (P.), KIEJNA (A.) – *Calculation of surface properties of bcc iron*. Vacuum, vol. n°74, pp. 179-183, 2003.

[BOR05\_I] BORDET (S. R.), KARTENSEN (A. D.), KNOWLES (D. M.), WIESNER (C. S.) – *A new statistical local criterion for cleavage fracture in steel. Part I : model presentation*. Engineering Fracture Mechanics, vol. n°72, pp. 435-452, 2005.

[BOR05\_II] (S. R.), KARTENSEN (A. D.), KNOWLES (D. M.), WIESNER (C. S.) – *A new statistical local criterion for cleavage fracture in steel. Part II : application to an offshore structural steel*. Engineering Fracture Mechanics, vol. n°72, pp. 453-474, 2005.

[BOW84] BOWEN (P.) – *Effects of microstructure on toughness in pressure vessel steel*. Thèse de Doctorat, University of Cambridge, 1984.

[BRO78] BROZZO (P.), BUZZICHELII (G.), MANSCANZONI (A.), MIRABILE (M.) – *Microstructure and cleavage resistance of low carbon bainitic steels*. Metal Science, vol. n°11, pp. 123-129, 1978.

[BUG00] BUGAT (S.) – *Comportement et endommagement des aciers austéno-ferritiques vieillis : une approche micromécanique*. Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2000.

[CAR99] CARASSOU (S.) – *Déclenchement du clivage dans un acier faiblement allié : rôle de l'endommagement ductile localisé autour des inclusions*. Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 1999.

[COT58] COTTRELL (A. H.) – *Theory of brittle fracture in steel and similar metals* – Transaction of the Metallurgical Society of the AIME, vol. n°211, pp. 192-203, 1958.

[CHR95] CHRISTIAN (J. W.), MAHAJAN (S.) – *Deformation twinning*. Progress in Materials Science, vol. n°39, pp. 1-157, 1995.

[CUR78] CURRY (D. A.), KNOTT (J. F.) – *Effect of microstructure on cleavage fracture stress in mild steel*. Metal Science, vol. n°12, pp. 511-514, 1978.

[CUR80] CURRY (D. A.) - *Cleavage micromechanisms of crack extensions in steels*. Metal Science, vol. n°14, pp. 319-326, 1980.

[LEC06\_I] LE CORRE (V.), CHAPULIOT (S.), DEGALLAIX (S.), FISSOLO (A.) – *Transferability of cleavage appearance temperature from laboratory specimen to structure*. MECAMAT, 9<sup>th</sup> European Mechanics of Materials Conference: Local Approach to Fracture, EDF Renardières, Moret-sur-Loing, 2006.

[LEC06\_II] LE CORRE (V.) – *Etude de la compétition déchirure ductile/fragile: application à la tenue mécanique des tubes en acier C-Mn et de leurs joints soudés*. Thèse de Doctorat, Ecole Centrale Lille, 2006.

[FAL04] FALESKOG (J.), KROON (M.), ÖRBERG (H.) – *A probabilistic model for cleavage fracture with a length scale – parameter estimation and predictions of stationary crack experiments*. Engineering Fracture Mechanics, vol. n°71, pp. 57-79, 2004.

[FPZ93] FRANCOIS (D.), PINEAU (A.), ZAOUI (A.) – *Comportement mécanique des matériaux : viscoplasticité, endommagement, mécanique de la rupture, mécanique du contact*. Editions Hermès, 1993.

[FRI64] FRIEDEL (J.) – *Dislocations*. Pergamon Press Editions, 1964.

[GRI20] GRIFFITH (A. A.) – *The phenomena of rupture and flow in solids*. Philosophical Transactions of the Royal Society of London, serie A vol. n°211, pp. 163-198, 1920.

[HAH84] HAHN (G. T.) – *The influence of microstructure on brittle fracture toughness*. Metallurgical Transactions, vol. n°15, pp. 947-959, 1984.

[HAJ06] HAJJAJ (M.) – *Propagation dynamique et arrêt de fissure de clivage dans un acier bainitique*. Thèse de Doctorat, Ecole Centrale Paris, 2006.

[HAU02] HAUSILD (P.) – *Transition ductile / fragile dans un acier faiblement allié*. Thèse de Doctorat, Ecole Centrale Paris, 2002.

[HUT68] HUTCHINSON (J. W.) – *Singular behaviour at the end of a tensile crack in a hardening material*. Journal of Mechanics and Physics of Solids, vol. n°18, pp. 293-297, 1951.

[IML04] IM (Y. R.), LEE (B. J.) – *Effect of microstructure on the cleavage fracture strength of low carbon Mn-Ni-Mo bainitic steels*. Journal of Nuclear Materials, vol. n°324, pp. 33-40, 2004.

[JAY77] JAYATILAKA (A. De S.), TRUSTRUM (K.) – *Statistical approaches to brittle fracture*. Journal of Material Science, n°12, pp. 1426-1430, 1977.

[KRO05] KROON (M.), FALESKOG (J.) – *Micromechanics of cleavage fracture initiation in ferritic steels by carbide cracking*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, vol. n°53, pp. 171-196, 2005.

[LEE02] LEE (S.), KIM (S.), HWANG (B.), LEE (B. S.), LEE (C.G.) – *Effect of carbide distribution on the fracture toughness in the transition temperature region of an SA 508 steel*. Acta Materallia, vol. n°50, pp. 4755-4762, 2002.

[LIN87] LIN (T.), EVANS (A. G.) – *Stochastic modelling of the independent roles of particle size and grain size in transgranular cleavage fracture*. Metallurgical Transactions A, vol. n°18, pp. 641-651, 1987.

[LIN70] LINDLEY (T. C.), OATES (G.), RICHARDS (C. E.) – *A critical appraisal of carbide cracking mechanisms in ferrite / carbide aggregates*. Acta Metallurgica, vol. n°18, pp. 1127-11367, 1970.

[MA98] MA (H.) – *The effect of stress triaxiality on the local cleavage stress in a granular bainitic weld metal*. International Journal of Fracture, vol. n°89, pp. 143-157, 1998.

[MÄN99] MÄNTYLÄ (M.), ROSSOL (A.), NEDBAL (I.), PRIOUL (C.), MARINI (B.) – *Fractographic observations of cleavage fracture initiation in a bainitic A508 steel*. Journal of Nuclear Materials, vol. n°264, pp. 257-262, 1999.

[MAR94] MARTIN-MEIZOSO (A.), OCANA-ARIZCORRETA (I.), GIL-SEVILLANO (J.), FUNRES-PEREZ (M.) – *Modelling cleavage fracture of bainitic steels*. Acta Materallia, vol. n°6, pp. 2057-2068, 1994.

[MAR98] MARGOLIN (B. Z.), GULENKO (A. G.), SHVESTSOVA (V. A.) – *Improved probabilistic mode for fracture toughness prediction based for nuclear pressure vessel steels*. International Journal of Pressure Vessels and Piping, vol. n°75, pp. 843-855, 1998.

[MAR03] MARINI (B.) – *Mécanismes de déclenchement du clivage des aciers de cuve*. Document Technique du Département des Matériaux pour le Nucléaire (DMN), CEA Saclay, 2003.

[MAT06] MATHIEU (J. P.) – *Analyse et modélisation micro-mécanique du comportement et de la rupture fragile de l'acier 16MND5 : prise en compte des hétérogénéités microstructurales*. Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Arts et Métiers, CER de Metz, 2006.

[NOH03] NOHAVA (J.), HAUSILD (P.), KARLIK (M.), BOMPARD (P.) – *Electron backscattering diffraction analysis of secondary cleavage cracks in a reactor pressure vessel steel*. Materials characterization, vol. n°49, pp. 211-217, 2003.

[ORT96] ORTNER (S. R.), HIPPSLEY (C. A.) – *Two component description of ductile to brittle transition in ferritic steel*. Science Technology, vol. n°12, pp. 1035-1042, 1996.

[ORT05] ORTNER (S.R.), DUFF (J.), BEARDSMORE (D. W.) – *Characterization of Euro A reference steel for application of EOH model of brittle fracture*. Technical report SA/EIG/15234/R003, Project PERFECT, SERCO Assurance, 2005.

[PES04] PESCI (R.) – *Etude micromécanique et caractérisation expérimentales du comportement et de l'endommagement de l'acier de cuve 16MND5 à basses températures*. Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Arts et Métiers, CER Metz, 2004.

[REN98] RENEVEY (S.) – *Approches globale et locale de la rupture dans le domaine de transition ductile-fragile d'un acier faiblement allié*. Thèse de Doctorat, Université Paris 11 Orsay / CEA.

[RKR73] RITCHIE (R.O.), KNOTT (J.F.), RICE (J.R.) – *On the relationship between critical tensile stress and fracture toughness in mild steel*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, vol. n°21, pp. 395-410, 1973.

[ROO05] ROOS (E.), STUMPFROCK (L.), SCHULER (X.), EISELE (U.) – *Fracture mechanics safety analysis of component based on fracture characteristics combined with multi-axiality of stress state*. International Journal of Pressure Vessels and Piping, vol. n°82, pp. 355-362, 2005.

[ROS98] ROSSOL (A.) – *Détermination de la ténacité d'un acier faiblement allié à partir de l'essai Charpy instrumenté*. Thèse de Doctorat, Ecole Centrale Paris, 1998.

[SMI66] SMITH (E.) – *The nucleation and growth of cleavage microcracks in mild steel*. Proceedings of 'The Physical Basis of Yield and Fracture', Institute of Physics and Physics Society, Oxford, pp. 36-46, 1966.

[STR54] STROH (A. N.) – *The formation of cracks as a result of plastic flow*. Proceedings of the Royal Society London A, vol. n°223, pp. 404-414, 1954.

[TAN01] TANGUY (B.) – *Modélisation de l'essai Charpy par l'approche locale de la rupture. Application au cas de l'acier 16MND5 dans le domaine de la transition*. Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2001.

[TAN03] TANGUY (B.), BESSON (J.), PINEAU (A.) – *Comment on 'Effect of carbide distribution on the fracture toughness in the transition temperature region of an AS 508 steel'*. Scripta Materialia, vol. n°49, Issue 2, pp. 191-197, 2003.

[TAN05] TANGUY (B.), BESSON (J.), PIQUES (R.), PINEAU (A.) – *Ductile to brittle transition of an A508 steel characterized by Charpy impact test. Part II : modelling of the Charpy transition curve*. – Engineering Fracture Mechanics, vol. n°72, pp. 413-434, 2005.

[TET63] TETELMAN (A. S.) – *Fracture of Solids*. Gordon and Breach Editions, p. 461, 1963.

[WEI51] WEIBULL (W.) – *A statistical distribution function of wide applicability*. Journal of Applied Mechanics, ASME, vol. n°18, pp. 293-297, 1951.

[WST84] WALLIN (K.), SAARIO (K.), TÖRRÖNEN (T.)- *Statistical Model for Carbide Induced Brittle Fracture in Steel*. Metal Science, vol. n°18, pp. 13-16, 1984.

[YAN03] YANG (W. J.), LEE (B. S.), WANG (G. Z.), LIU (Y. G.) – HONG (J. H.) – *Application of the local fracture stress model on the cleavage fracture of the reactor pressure vessel steels in the transition temperature region*. Journal of Nuclear Materials, vol. n°317, pp. 324-242, 2003.

[YAN04] YANG (W. J.), LEE (B. S.), OH (Y. J.), HUH (M. Y.), HONG (J. H.) – *Microstructural parameters governing cleavage fracture behaviours in the ductile-brittle transition region in reactor pressure vessel steels*. Materials Science and Engineering A, vol. n°379, pp.17-26, 2004.

[ZEN48] ZENER (C.) – *Fracturing of metals*. 29th National Metal Congress and Exposition, American Society for Metals, pp. 3-31, 1948.

[ZHA99] ZHANG (X. Z.), KNOTT (J. F.) – *Cleavage fracture in bainitic and martensitic microstructures*. Acta Materallia, vol. n°47, pp. 3483-3495, 1999.

## **Conclusion générale**

## Synthèse des principaux résultats

Ces travaux de thèse s'inscrivent dans le cadre de la prédiction de la ténacité dans les aciers faiblement alliés. Cette thématique de recherche pose deux problèmes majeurs :

- Une forte dépendance en température des valeurs de ténacité et de résilience, associée à une dispersion significative, est observée à l'approche du domaine de transition ductile / fragile.
- Les procédés d'élaboration des constituants des cuves de réacteurs nucléaires sont à l'origine de fluctuations de la microstructure pouvant affecter les propriétés de résilience et de ténacité, en particulier dans le domaine de transition ductile / fragile..

Pour apporter des éléments de compréhension à ces problèmes, l'objectif principal de ces travaux de thèse était d'étudier l'effet des mécanismes locaux de déformation à l'échelle microscopique sur la rupture fragile dans un acier faiblement allié A508 Cl3 fourni par le CEA.

Afin d'améliorer la compréhension des mécanismes de rupture fragile, nous avons adopté une approche micromécanique du comportement, que nous avons ensuite couplée à un critère d'approche locale du clivage. Nous étudions plus particulièrement l'effet des hétérogénéités mécaniques locales sur la dispersion des contraintes à rupture.

### Caractérisation expérimentale :

Dans le cadre de la modélisation du comportement à l'échelle microscopique, la caractérisation expérimentale préalable du comportement macroscopique et microscopique du matériau est indispensable. L'effet de la température et l'influence de la microstructure ont fait l'objet d'une attention particulière.

Deux microstructures bainitique et martensitique, élaborées par trempe, ont été caractérisées en analyse EBSD et au MET. L'étude EBSD a permis de déterminer une taille de domaine cristallographiquement représentatif vis-à-vis de l'indice de texture  $J$  et l'indice de McKenzie  $M$ . Ces résultats ont par la suite été pris en compte dans le cadre de la modélisation micromécanique de la bainite. La densité de dislocations initiale, mesurée au MET, est de l'ordre de  $10^{14} \text{ m}^{-2}$  dans les deux microstructures bainitique et martensitique.

Les essais de traction simple montrent un fort effet de la température sur la limite d'élasticité : l'effet de la microstructure se traduit surtout par des valeurs de  $R^p_{0,2}$  plus élevées dans la martensite que dans la bainite. L'écroutissage macroscopique semble moins affecté par la température : il apparaît que le module d'écroutissage décroît avec la température, que ce soit dans la bainite ou la martensite.

Des essais de sauts de vitesse et de sauts de température ont également permis de déterminer le volume d'activation  $V^*$  et l'énergie d'activation  $\Delta G$ . Les valeurs de  $V^*$  et  $\Delta G$  sont fortement

dépendantes de  $T$  dans le domaine [25°C, -196°C], ce qui souligne le rôle important joué par les mécanismes d'activation thermique aux basses températures. De plus, les valeurs de  $V^*$  et  $\Delta G_0$  sont relativement proches de celles trouvées dans le fer- $\alpha$ . L'énergie libre d'activation  $\Delta G_0$  est de l'ordre de 1 eV à température ambiante dans la bainite (1,2 eV dans la martensite). Les résultats montrent également qu'à l'échelle macroscopique, la microstructure n'influe pas de façon significative sur le comportement activé thermiquement.

L'évolution de la ténacité  $K_{JC}$  a également été caractérisée en température pour les deux microstructures bainitique et martensitique. Les valeurs de  $K_{JC}$  sont plus élevées dans la bainite que dans la martensite, et les dispersions de  $K_{JC}$  augmentent fortement avec la température. Ces dispersions de  $K_{JC}$  sont globalement en accord avec celles prédites par l'approche de type 'Master Curve', mais elles semblent toutefois plus importantes dans la bainite que dans la martensite. En somme, si la microstructure n'influe pas fortement sur le module d'écrouissage ni sur le comportement activé thermiquement, elle conditionne cependant significativement les propriétés de ténacité de l'acier de cuve.

L'analyse fractographique des éprouvettes CT montre que la rupture est de nature transgranulaire fragile. La plupart des sites d'amorçage du clivage ne présentent pas de particules de seconde phase apparentes. Cette observation n'est pas incompatible avec l'hypothèse d'une rupture amorcée sur des carbures. Néanmoins, deux éprouvettes présentent une rupture amorcée sur des particules de MnS.

### **Formulation du modèle et identification des paramètres :**

Afin de décrire les mécanismes de plasticité 'basse température' dans les aciers faiblement alliés, un modèle de comportement micromécanique a été proposé et implémenté dans le formalisme des grandes transformations :

- La loi d'écoulement activée thermiquement traduit le mécanisme d'avancée des dislocations vis par succession de doubles décrochements.
- La loi d'écrouissage décrit la transition de comportement plastique entre les régimes 'athermique' et 'basses températures'. L'activation préférentielle des systèmes de glissement  $\langle 111 \rangle \{ 110 \}$  par rapport aux systèmes  $\langle 111 \rangle \{ 112 \}$  est prise en compte.
- La loi d'évolution des densités de dislocations est modifiée de manière à introduire une dépendance en température des mécanismes de production et d'annihilation des dislocations.

Ce type de modèle présente l'inconvénient de faire appel à de multiples paramètres dont certains ne sont pas accessibles expérimentalement. L'identification des paramètres a été réalisée par méthode inverse (logiciel SiDoLo) : des simulations sont réalisées sur une microstructure simplifiée (4100 éléments / 512 orientations cristallographiques) et comparées aux courbes de traction monotones à différentes températures.

Dans un premier temps, notre démarche a consisté à séparer les paramètres 'accessibles' expérimentalement de ceux qui ne sont accessibles que par identification inverse. Afin de restreindre le nombre de paramètres à identifier par méthode inverse, les paramètres  $\rho_0$  et  $\Delta G_0$  ont été déterminés expérimentalement à partir des résultats du chapitre III.



L'identification par méthode inverse porte principalement sur quatre paramètres non accessibles expérimentalement et qui commandent l'érouissage :  $\tau_0$ ,  $a^{su}$ ,  $K$  et  $g_c$ . On obtient les résultats suivants :

- L'accord expérience / simulation n'est pas très satisfaisant si on considère les paramètres  $K$  et  $g_c$  constants, ce qui reviendrait à supposer que les mécanismes de production et d'annihilation des dislocations ne dépendent pas de la température.
- L'accord expérience / simulation est meilleur lorsque les paramètres  $K$  et  $g_c$  sont pris dépendants de la température. Ce résultat trouve également une justification théorique dans la mesure où les mécanismes de production et d'annihilation des dislocations sont affectés par la température.  $K$  et  $g_c$  constituent deux paramètres 'clé' accessibles uniquement par identification inverse.

En conclusion, une procédure simplifiée d'identification des paramètres a été proposée pour appliquer la démarche d'identification à la microstructure martensitique, ou à d'autres nuances d'aciers de cuve.

### **Simulation numérique des hétérogénéités locales :**

Une modélisation micromécanique du comportement de l'acier de cuve bainitique a été mise en place afin d'étudier l'évolution des distributions locales de contrainte principales  $\sigma_I$  à l'échelle du volume élémentaire  $V_0$  de l'approche locale de la rupture.

Le chapitre III montre que la taille de domaine EBSD cristallographiquement représentative est de l'ordre de  $300 \times 300 \mu\text{m}^2$ . Pour des raisons numériques, nous avons restreint la taille d'agrégat à  $200 \times 200 \times 3 \mu\text{m}^3$  (3 couches d'éléments). Le volume de l'agrégat polycristallin correspond approximativement à un volume élémentaire  $V_0 = (50 \mu\text{m})^3$ . Afin de déterminer si cette taille de microstructure est représentative par rapport aux distributions de contraintes locales, des simulations ont été réalisées dans deux microstructures différentes mais de même taille. Les conditions aux limites sont de type déformations planes et pilotées en triaxialité, de manière à imposer un chargement mécanique proche de celui rencontré dans une éprouvette CT en fond de fissure.

Nous montrons que les distributions de  $\sigma_I$  sont d'autant plus dispersées que la température  $T$  est élevée ou que la triaxialité  $\chi$  est faible. L'étalement des distributions de  $\sigma_I$  est également corrélé à la déformation équivalente moyenne  $\langle \varepsilon_{eq} \rangle$ . Les distributions de  $\sigma_I$  sont proches entre les deux microstructures, ce qui suggère que la taille de microstructure de  $200 \times 200 \times 3 \mu\text{m}^3$  est représentative vis-à-vis des distributions de  $\sigma_I$ . Les distributions de contraintes de clivage  $\sigma_{\{100\}}$  présentent un aspect plus 'bruité', particulièrement à faible déformation, et elles sont très différentes des distributions de  $\sigma_I$ . Il semble que la description des hétérogénéités de  $\sigma_{\{100\}}$  nécessiterait l'utilisation d'agrégats plus représentatifs cristallographiquement.

Afin de disposer d'une fonction analytique décrivant l'évolution des dispersions de  $\sigma_I$  dans la microstructure, nous avons identifié des fonctions de distribution de type 'valeurs extrêmes' sur les distributions de  $\sigma_I$  dans les deux agrégats. Nous avons montré qu'il est possible

d'établir une expression statistique très générale de l'évolution des dispersions des valeurs de  $\sigma_I$  dans la microstructure, et ce quel que soit l'état de chargement :

$$P(\sigma < \sigma_I) = 1 - \exp \left[ - \exp \left( - \frac{\sigma_I - \langle \sigma_I \rangle}{\alpha \langle \sigma_{mises} \rangle + \beta(T)} + \Gamma'(I) \right) \right]$$

Cette fonction dépend de  $\langle \sigma_I \rangle$ , de  $\langle \sigma_{mises} \rangle$  et de  $T$  à travers le paramètre  $\beta$ . Le paramètre  $\alpha$  décroît légèrement avec la température. Des simulations de microstructures à d'autres températures permettraient d'affiner la dépendance  $\beta(T)$ .

Dans un critère d'approche locale de la rupture, cette description statistique a permis d'introduire les dispersions de contraintes locales à l'échelle du volume élémentaire.

### **Approche locale de la rupture fragile :**

Les modèles d'approche locale classiques présentent plusieurs limitations. Ces approches n'intègrent pas explicitement les données de l'échelle inférieure : par exemple, l'effet des hétérogénéités à l'échelle du volume élémentaire n'est pas pris en compte. Les effets de la température et de la triaxialité sont identifiés à partir d'essais macroscopiques.

Notre démarche s'est déroulée en deux étapes : dans un premier temps, l'objectif a été de déterminer dans quelle mesure les hétérogénéités de  $\sigma_I$  peuvent expliquer les dispersions de contrainte à rupture à l'échelle microscopique. Nous avons proposé un modèle d'approche locale de la rupture basé uniquement sur les hétérogénéités de  $\sigma_I$ , qui utilise la fonction statistique identifiée dans le **chapitre V**. On fait l'hypothèse d'une taille de carbures uniforme : le critère de Griffith définit une contrainte critique  $\sigma_c$  'déterministe' d'amorçage du clivage. Il y a rupture lorsque  $\sigma_I$  excède  $\sigma_c$  dans un paquet de lattes bainitique.

L'application de ce modèle d'approche locale a permis de montrer un effet de  $T$  et  $\chi$  sur la probabilité de rupture du volume élémentaire. D'autre part, pour des températures élevées ou des niveaux de triaxialité faibles, ce modèle reproduit les dispersions de contrainte à rupture prédites par les modèles d'approche locale 'classiques'. Cette approche suggère que dans certains cas de figure, les dispersions de contrainte à rupture peuvent être interprétées comme un effet des hétérogénéités mécaniques. Cependant, nous avons également montré que lorsque les dispersions de  $\sigma_I$  sont faibles, elles ne suffisent plus à expliquer la dispersion de contraintes à rupture aux faibles températures (triaxialités élevées). La prise en compte des distributions de tailles de défauts est alors indispensable.

Par la suite, nous avons proposé un second modèle d'approche locale de la rupture, intégrant à la fois les distributions de tailles de carbures et les hétérogénéités de  $\sigma_I$  dans la microstructure. Pour un carbure de taille  $r_c$ , la probabilité d'amorçage est définie comme le produit la densité  $f(r_c)$  de carbures de taille  $r_c$  et de la probabilité  $P(\sigma_I > \sigma_c)$  :

$$dP_{R0}(r_c) = f(r_c) \cdot P(\sigma_I > \sigma_c)$$

La probabilité de rupture  $P_{R0}$  dans le volume  $V_0$  est définie par l'intégrale de  $dP_{R0}(r_c)$  sur toutes les tailles de carbures :

$$P_{R0} = \int_{a/2}^{\infty} dP_{R0}(r_c) \cdot dr_c$$

Ce modèle donne des dispersions de contraintes à rupture du même ordre que celles prédites par le modèle de Beremin, y compris aux températures les plus basses. L'accord n'est cependant valable que pour des valeurs de  $P_{R0}$  de l'ordre de  $10^{-2}$  à  $10^{-1}$ , ce qui correspond à un état rompu à l'échelle d'une éprouvette macroscopique.

Par ailleurs, ce modèle permet de rendre compte de l'effet de la température, de la triaxialité et de la déformation sur l'évolution de la probabilité de rupture  $P_{R0}$ . A déformation fixée, la probabilité de rupture est une fonction décroissante de la température, et croissante de la triaxialité. L'effet de la déformation est d'autant plus marqué que la température est élevée.

Plus généralement, ce type d'approche permet d'introduire une dépendance de la probabilité de rupture en température et en triaxialité fondée uniquement sur la description locale du comportement. Il s'agit d'un des intérêts majeurs de ce type de modèle par rapport à des approches locales 'classiques' de la rupture.

## Perspectives

### Caractérisation expérimentale :

La caractérisation expérimentale a porté sur plusieurs aspects (caractérisation microstructurale, comportement activé thermiquement, essais de traction, ténacité). Cependant, nous ne disposons pas d'un moyen de caractérisation efficace des hétérogénéités de champs locaux dans la microstructure. Des mesures de micro-extensométrie pourraient permettre de mesurer les distributions de déformation et de faire une comparaison avec les distributions obtenues numériquement. Ce type d'approche ne peut toutefois donner des résultats satisfaisants que si on modélise la microstructure expérimentale réelle en trois dimensions, ce qui reste très fastidieux à mettre en œuvre dans les aciers faiblement alliés. D'autres méthodes, comme les mesures d'énergie stockée, pourraient également constituer une alternative pour caractériser les hétérogénéités dans les aciers de cuve.

Par ailleurs, il serait nécessaire de caractériser la fraction volumique et la morphologie des carbures dans notre matériau. On peut supposer que les distributions de tailles de carbures sont assez sensibles aux traitements thermiques de trempe et de revenu : la distribution de tailles de carbures proposée par Lee *et al.* [LEE02], bien qu'identifiée sur un acier de cuve de composition proche de notre matériau, est sans doute légèrement différente de la distribution réelle.

### Simulation numérique :

Nous avons utilisé un modèle micromécanique dont les équations sont basées sur les mécanismes de plasticité à froid mis en évidence dans le fer- $\alpha$  (mécanisme de double décrochement, loi d'érouissage 'basse température'). Cependant, les mécanismes de production et d'annihilation des dislocations ne sont pas encore bien identifiés dans le régime de comportement 'basse température'. Des hypothèses simplificatrices ont été émises pour

s'affranchir de ces difficultés. Afin de proposer une description plus 'physique' de ces mécanismes de déformation, il faudrait intégrer des informations provenant de l'échelle inférieure telles que des caractérisations au MET et des résultats de simulations en DDD.

Par ailleurs, nous avons concentré les travaux de simulation numérique et de modélisation de la rupture fragile sur la microstructure bainitique. Cette approche pourrait être étendue à la martensite : on dispose de toutes les données expérimentales (essais mécaniques, mesures de  $\rho_0$ ,  $\Delta G_0$ ) pour mener à bien l'identification des paramètres du modèle de comportement. L'étude EBSD montre également qu'une taille de domaine de  $150 \times 150 \mu\text{m}^2$  utilisée dans la bainite serait représentative cristallographiquement (cf. Barcelo *et al.* [BAR05]).

Les calculs d'agrégats suggèrent que la microstructure bainitique de  $200 \times 200 \times 3 \mu\text{m}^3$  est représentative vis-à-vis des distributions de  $\sigma_I$ , mais que ce n'est plus le cas lorsqu'on étudie les distributions de  $\sigma_{\{100\}}$ . Des simulations réalisées sur des agrégats de plus grande taille permettraient de juger de la possibilité de décrire les distributions de  $\sigma_{\{100\}}$  par une fonction statistique de distribution de type Gumbel.

D'autre part, des travaux ont montré la nécessité de réaliser des calculs de microstructure sur des agrégats tridimensionnels massifs [DIA05], surtout si l'on souhaite valider la modélisation par des mesures de micro-extensométrie réalisées en surface. La reconstruction d'une microstructure bainitique réelle reste un problème complexe : des travaux prometteurs visent aujourd'hui à reconstruire numériquement des microstructures bainitiques [OSI06].

Enfin, une des finalités de ce genre d'approche est de décrire le comportement du matériau à l'état irradié à l'échelle de la plasticité cristalline. La prise en compte de l'irradiation nécessiterait d'introduire l'effet des interactions dislocations-défauts d'irradiation dans la loi d'érouissage.

### Modélisation de la rupture fragile :

L'identification des distributions de tailles de carbures dans la bainite et la martensite permettrait d'améliorer la description de la microstructure et également d'étudier l'influence de la microstructure sur la dispersion des contraintes à rupture. Nous avons également rappelé dans l'étude bibliographique qu'il n'y avait aucun consensus sur les valeurs d'énergie de surface à considérer dans le critère de propagation : nous avons fait l'hypothèse d'une valeur d'énergie de surface constante et égale à l'énergie de cohésion atomique  $\gamma_s = 2 \text{ J.m}^{-2}$ . La plupart des valeurs de  $\gamma_s$  disponibles dans la littérature sont identifiées à partir des résultats macroscopiques. Il faudrait disposer d'informations provenant des échelles inférieures pour identifier précisément la valeur de  $\gamma_s$  et son éventuelle dépendance en température. Une étape préliminaire pourrait consister à réaliser une étude paramétrique sur l'influence de  $\gamma_s$  sur la probabilité de rupture du volume élémentaire. L'amélioration de la connaissance des initiateurs du clivage constitue également un élément indispensable au développement de ce type d'approche.

L'application du modèle d'approche locale à des calculs numériques d'éprouvettes CT constituerait un autre développement intéressant à ces travaux. Ces résultats pourraient être comparés avec les dispersions expérimentales de ténacité mesurées sur des éprouvettes CT dans le **chapitre III**.

## Références bibliographiques

[BAR05] BARCELO (F.), BECHADE (J. L.), PELE (J.) – *Détermination du Volume Elementaire Représentatif d'un acier de cuve 16MND5*. – Document Technique du Département des Matériaux pour le Nucléaire (DMN), CEA Saclay, 2005.

[DIA05] DIARD (O.), LECLERC (S.), ROUSSELIER (G.), CAILLETAUD (G.) – *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, vol. n°21, PP. 691-722, 2005.

[LEE02] LEE (S.), KIM (S.), HWANG (B.), LEE (B. S.), LEE (C.G.) – *Effect of carbide distribution on the fracture toughness in the transition temperature region of an SA 508 steel*. Acta Materallia, vol. n°50, pp. 4755-4762, 2002.

[OSI06] OSIPOV (N.), GOURGUES-LORENZON (A.F.), CAILLETAUD (G.), DIARD (O.), MARINI (B.) – *Numerical generation and study of synthetic bainitic microstructures*. MATERIAUX 2006, 2ème Conférence interdisciplinaire sur les matériaux, Dijon, 2006.

# **Annexes**

## SOMMAIRE

<b>A. Approche probabiliste de l'écrouissage : modèle de Stainier, Cuitiño, Ortiz [STA02].....</b>	<b>241</b>
A.1 Présentation du modèle.....	243
A.2 Similitudes entre l'approche probabiliste de Stainier et le modèle de Rauch	252
<b>B. Essais mécaniques de traction simple, de sauts de vitesse et de sauts de température.....</b>	<b>255</b>
B.1 Essais de traction simple .....	257
B.2 Essais de sauts de vitesse et sauts de température.....	266
<b>C. Essais de ténacité et analyse fractographique des éprouvettes CT.....</b>	<b>269</b>
C.1 Résultats des essais de ténacité.....	271
C.2 Etude fractographique.....	279
<b>D. Caractérisation de la microstructure au MET et mesure de la densité de dislocations.....</b>	<b>287</b>
D.1 Observations MET .....	289
D.2 Mesures de densité moyenne de dislocations .....	302

**E. Simulation des hétérogénéités mécaniques locales.....305**

**E.1 Résultats de simulation numérique : cartographies..... 307**

**E.2 Résultats de simulation numérique : histogrammes de distribution de  $\sigma_I$  et  $\sigma_{I100}$  ..... 314**

**E.3 Etude qualitative de l'évolution des hétérogénéités de contraintes principales maximales  $\sigma_I$  ..... 333**

**E.4 Etude quantitative des distributions de contraintes principales  $\sigma_I$  dans la microstructure ..... 337**

**F. Modélisation d'approche locale de la rupture.....371**

**F.1 Quelques modèles d'approche locale de la rupture ..... 373**

**F.2 Critère d'amorçage du clivage prenant en compte les défauts et les hétérogénéités de champs mécaniques : résultats..... 377**





## Annexe A

### **Approche probabiliste de l'écrouissage : modèle de Stainier, Cuitiño, Ortiz [STA02]**

## TABLE DES MATIERES

### A. Approche probabiliste de l'écrouissage : modèle de Stainier, Cuitiño, Ortiz [STA02]

<b>A.1</b>	<b>Présentation du modèle.....</b>	<b>243</b>
<i>A.1.a</i>	<i>Mécanisme élémentaire de franchissement d'un obstacle.....</i>	<i>243</i>
<i>A.1.b</i>	<i>Calcul de la probabilité <math>P^s(\tau,t)</math>.....</i>	<i>245</i>
<i>A.1.c</i>	<i>Loi d'écrouissage : évolution de la cission <math>\bar{\epsilon}</math> au cours de la déformation.....</i>	<i>249</i>
<i>A.1.d</i>	<i>Loi d'évolution des densités de dislocations <math>\rho^s</math>.....</i>	<i>250</i>
<b>A.2</b>	<b>Similitudes entre l'approche probabiliste de Stainier et le modèle de Rauch</b>	<b>252</b>

## A.1 Présentation du modèle

Ce modèle propose de prendre en compte tout un ensemble de mécanismes caractéristiques du comportement des matériaux de structure C.C. pour  $T < T_a$  :

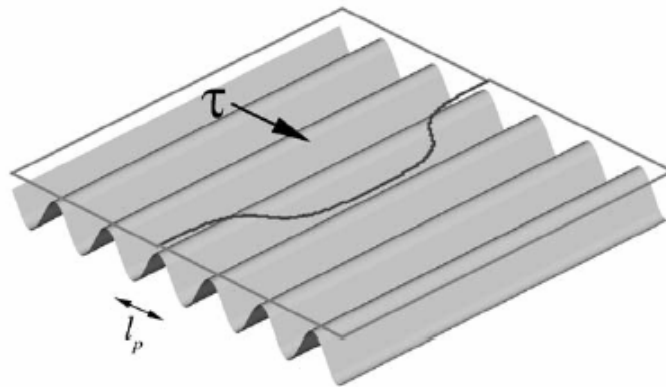
- mécanisme d'avancée des segments vis par doubles décrochements ;
- prise en compte de l'écrouissage de type forêt ;
- influence d'autres mécanismes tels que le glissement dévié sur la production et l'annihilation des dislocations.

Cette description est basée sur le principe suivant : sur un système de glissement ( $s$ ), la cission critique  $\tau_c^s$  est définie comme étant la somme de la contribution de la contrainte effective résultant de l'activation thermique d'une part et de l'écrouissage 'forêt' d'autre part. Tous ces mécanismes sont intégrés en utilisant une approche probabiliste, de sorte que cette décomposition de  $\tau_c^s$  n'apparaît jamais explicitement dans les équations du modèle.

Ce modèle est très différent de tous ceux décrits jusqu'ici car il fait appel à des notions probabilistes pour prédire le mouvement de percolation des dislocations à travers une forêt d'obstacles. Dans un souci de clarté, nous avons choisi de conserver les notations introduites par les auteurs, tout en indiquant leur correspondance avec celles déjà utilisées dans d'autres modèles.

### A.1.a Mécanisme élémentaire de franchissement d'un obstacle

Dans un premier temps, la démarche des auteurs consiste à exprimer la contrainte effective en se fondant sur le mécanisme de mobilité des dislocations vis par double décrochement, déjà décrit dans le **chapitre II**.



**Fig. A.1** : Principe du mécanisme de double décrochement [STA03]

Si on considère, sur un système ( $s$ ), un segment vis soumis à une cission effective  $\tau_{eff}$ , l'enthalpie  $\Delta G$  de formation d'un double décrochement (illustrée sur la figure A.1) vaut respectivement :

$$\Delta G^+ \approx E^{kink} - \tau_{eff} b L^{kink} l_p \quad (\text{nucléation dans le sens de } \tau^s) \quad (\text{A.1})$$

$$\Delta G^- \approx E^{kink} + \tau_{eff} b L^{kink} l_p \quad (\text{nucléation dans le sens opposé}) \quad (\text{A.2})$$

Avec :

- $E^{kink}$  : hauteur de la barrière énergétique (correspond à  $\Delta G_0$ )
- $L^{kink}$  : longueur caractéristique du double décrochement (correspond à  $l_c$ )
- $l^p$  : distance séparant deux vallées de Peierls (du même ordre que  $b$ )

En notant  $\tau_p$  la contrainte de nucléation d'un double décrochement sans apport de l'activation thermique, on obtient une expression de la forme :

$$\Delta G^\pm \approx E^{kink} \left( 1 \mp \frac{\tau_{eff}}{\tau_p} \right) \quad \text{avec} \quad \tau_p = \frac{E^{kink}}{b L^{kink} l_p} \quad (\text{A.3})$$

La vitesse moyenne des segments vis (dans le sens '+') vaut alors :

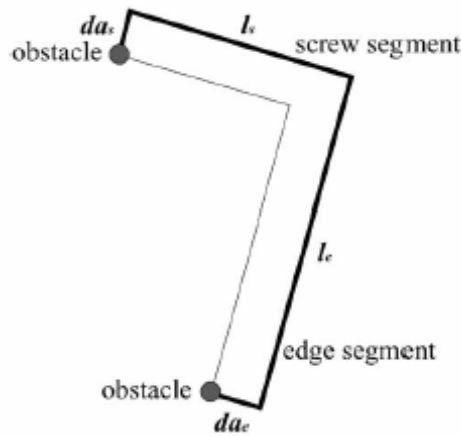
$$v_m = l_p v_D \exp\left[-\frac{\Delta G^+}{kT}\right] - l_p v_D \exp\left[-\frac{\Delta G^-}{kT}\right] \quad (\text{A.4})$$

Par la relation d'Orowan, on en déduit la vitesse moyenne de glissement sur le système ( $s$ ) :

$$\dot{\gamma} = \dot{\gamma}_0^{kink} \exp\left[-\frac{E^{kink}}{kT}\right] \sinh\left[\frac{E^{kink}}{kT} \frac{\tau_{eff}}{\tau_p}\right] \quad \text{avec} \quad \dot{\gamma}_0^{kink} = 2b \rho^s l_p v_D \quad (\text{A.5})$$

On obtient finalement l'expression de la contrainte effective nécessaire au franchissement des barrières énergétiques que constituent les vallées de Peierls :

$$\frac{\tau_{eff}}{\tau_p} = \frac{kT}{E^{kink}} \operatorname{arcsinh}\left[\frac{\dot{\gamma}^{kink}}{\dot{\gamma}_0^{kink}} \exp\left(\frac{E^{kink}}{kT}\right)\right] \quad (\text{A.6})$$



**Fig. A.2** : Mécanisme élémentaire de franchissement d'un obstacle par une dislocation

Les auteurs se fondent sur un mécanisme élémentaire de franchissement des obstacles (figure A.2) pour établir une expression de la probabilité de rencontrer un obstacle de résistance  $\tau$  sur un système de glissement ( $s$ ).

Ils ont considéré un segment de dislocation ancré sur 2 arbres de la forêt et comportant une partie vis de longueur  $l_s$  et une partie coin de longueur  $l_e$ . Lorsque la dislocation, sous l'effet d'une cisssion appliquée  $\tau$ , avance d'une distance  $da_s$  suivant sa partie vis et  $da_e$  suivant sa partie coin, l'énergie fournie pour franchir l'obstacle doit excéder le surcroît d'énergie relatif au franchissement des vallées de Peierls et à l'allongement du brin de dislocation :

$$\tau b l_e da_e + \tau b l_s da_s \geq \tau_{eff}^{edge} b l_e da_e + \tau_{eff}^{screw} b l_s da_s + 2U_{edge} da_s + 2U_{screw} da_e \quad (A.7)$$

$\tau_{eff}^{edge}$  et  $\tau_{eff}^{screw}$  désignent les contraintes effectives liées au franchissement des vallées de Peierls pour les segments coin et vis respectivement,  $U_{edge}$  et  $U_{screw}$  désignant de manière analogue les énergies de ligne pour les deux configurations. La spécificité du glissement dans les métaux de structure C.C. conduit à faire l'hypothèse que les termes  $\tau_p^{edge}$  et  $U_{screw}$  sont négligeables devant  $\tau_p^{screw}$  et  $U_{edge}$ . L'équation (A.8) se simplifie sous la forme :

$$\tau^s \geq \tau = \tau_{eff}^{screw} + \frac{2U_{edge}}{b l_s} \quad (A.8)$$

La cisssion appliquée  $\tau^s$  se décompose en deux contributions, la contrainte effective liée au mécanisme de double décrochement, et un terme d'écrouissage qui dépend de la longueur de segment vis : ce dernier terme est donc fonction de la température et de l'écrouissage. Il s'agit d'un terme de tension de ligne qui dépend à la fois de l'activation thermique et de la densité d'obstacles (de dislocations ici).

Dans ce modèle, l'écrouissage est décrit par une approche statistique. Les auteurs introduisent une variable aléatoire  $\tau$ , qui correspond à la cisssion nécessaire pour qu'une dislocation franchisse un obstacle de type forêt. A partir de cette variable, on construit une fonction densité de probabilité  $f^s(a,t)$  qui définit la fraction d'obstacles de cisssion critique  $a$  sur le système ( $s$ ). La probabilité qu'un obstacle du système ( $s$ ) ait une cisssion critique égale à  $\tau$  vaut donc :

$$P^s(\tau,t) = \int_0^{\tau} f^s(a) da \quad (A.9)$$

Le calcul de  $f^s(t)$  et  $P^s(t)$  est explicité dans le sous chapitre-suivant.

### A.1.b Calcul de la probabilité $P^s(\tau,t)$

Afin de calculer la probabilité  $f^s(\tau,t)$ , les auteurs considèrent une fonction de répartition des obstacles, c'est-à-dire des arbres de la forêt de dislocations, sur le plan de glissement ( $s$ ).

**Cas des arbres de la forêt supposés de résistance infinie :**

Si on considère qu'un obstacle est constitué de deux arbres plus proches voisins et distants de  $r$ , la fonction de répartition  $\tilde{f}_0^s(r,t)$  de la distance entre 2 arbres d'un obstacle donné s'écrit :

$$\tilde{f}_0^s(r,t) = 2\pi n^s r \exp[-\pi n^s r^2] \quad (\text{A.10})$$

La probabilité  $dP_0^s(r,t)$  de trouver un arbre de la forêt dans un disque de rayon autour d'un arbre centré en  $r = 0$  correspond alors à la probabilité de trouver un obstacle dans ce même disque :

$$dP_0^s(r,t) = n^s r \exp[-\pi n^s r^2] dr d\theta \quad (\text{A.11})$$

En posant le changement de variable  $x = R \cos\theta$  et  $y = R \sin\theta$ , l'équation (A.11) peut s'exprimer en coordonnées cartésiennes dans le repère formé par les directions coin (abscisses) et vis (ordonnées) :

$$dP_0^s(r,t) = n^s \exp[-\pi n^s (x^2 + y^2)] dx dy \quad (\text{A.12})$$

La probabilité de trouver un obstacle dont les 2 arbres de la forêt soient séparés par une distance  $l_s$  dans la direction vis vaut par conséquent :

$$\tilde{f}_0^s(l_s,t) = 2 \int_{-\infty}^{+\infty} n^s \exp[-\pi n^s (x^2 + l_s^2)] dx = \sqrt{n^s} \exp[-\pi n^s l_s^2] \quad (\text{A.13})$$

La contrainte critique de franchissement de l'obstacle ne dépend que de  $l_s$  d'après l'équation (I.88), ce qui amène tout naturellement à considérer le changement de variable suivant :

$$\tau = \tau_p^s + \frac{2U_{edge}}{bl_s} \quad (\text{A.14})$$

L'équation (I.A.4) peut donc s'exprimer comme étant fonction de la variable aléatoire  $\tau$  :

$$\tilde{f}_0^a(\tau,t) = \frac{4\sqrt{n^s} U_{edge}}{b(\tau - \tau_p^s)^2} \exp\left(-\frac{\pi n^s}{b^2} \frac{2\sqrt{\pi n^s} U_{edge}}{b(\tau - \tau_p^s)}\right) \quad (\text{A.15})$$

La probabilité qu'un obstacle ait une cission critique de franchissement supérieure à  $\tau$  est donc égale à :

$$\tilde{P}_0^s(\tau,t) = 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{2\sqrt{\pi n^s} U_{edge}}{b(\tau - \tau_p^s)}\right) \quad (\text{A.16})$$

**b) Prise en compte de la résistance des arbres de la forêt :**

Les équations (A.15) et (A.16) ne sont valables que si l'on considère que  $\tau$  peut prendre une valeur quelconque. En réalité il ne peut y avoir franchissement d'un obstacle qu'au dessus d'un seuil minimal. Plus précisément, le calcul de  $\tilde{f}_0^a(\tau, t)$  suppose qu'il ne peut y avoir désancrage des jonctions avec les arbres de la forêt. Supposons maintenant que la dislocation peut se libérer d'un de ses points d'ancrage lorsque la cission appliquée dépasse une valeur critique  $\tau^{su}$ , ( $u$ ) désignant le système auquel appartient la dislocation forêt considérée. Bien entendu, toutes les dislocations de type forêt n'interagissent pas de la même manière avec les dislocations du système ( $s$ ). Soit  $\tilde{f}^s(\tau, t)$  l'expression de  $\tilde{f}_0^a(\tau, t)$  dans le cas où les jonctions avec les arbres de la forêt peuvent se défaire :

$$\tilde{f}^s(\tau, t) = \sum_{s \neq u} p^{su}(t) \tilde{f}^s(\tau/\tau^{su}, t) \quad (\text{A.17})$$

La probabilité  $p^{su}(t)$  que le point d'ancrage 'le plus faible' de l'obstacle soit une dislocation du système ( $u$ ) est égale à :

$$p^{su}(t) = \frac{n^{su}}{n^s} \left( \frac{n^{su}}{n^s} + 2 \sum_{\tau^{su} > \tau} \frac{n^{su}}{n^s} \right) \quad (\text{A.18})$$

Avec :

- $n^{su}$  : densité d'obstacles sur le système ( $s$ ) constitués par des dislocations du système ( $u$ )
- $n^s$  : densité totale d'obstacles sur le système ( $s$ ).  $n^s$  vérifie la relation :  $n^s = \sum_u n^{su}$

Supposons que l'un des deux points d'ancrage ne peut supporter une cission supérieure à  $\tau^{su}$ . Dans ce cas, si on fait appel à la notion de probabilités conditionnelles, la probabilité que l'obstacle cède pour une cission critique  $\tau$  s'exprime :

$$\tilde{f}^s(\tau/\tau^{su}, t) = \frac{\tilde{f}_0^s(\tau/\tau^{su}, t)}{\tilde{P}_0^s(\tau^{su}, t)} (1 - H(\tau - \tau^{su})) \quad (\text{A.19})$$

$H(\tau - \tau^{su})$  désigne la fonction Heaviside (égale à 1 si  $\tau > \tau^{su}$  et à 0 sinon).

L'équation (A.19) traduit simplement le fait que la variable aléatoire  $\tau$  ne peut être inférieure à une valeur critique  $\tau^{su}$ . Les équations (A.17) et (A.19) conduisent à l'expression suivante pour  $\tilde{f}^s(\tau, t)$  :

$$\tilde{f}^s(\tau, t) = \sum_{s \neq u} \frac{p^{su}(t) \tilde{f}_0^s(\tau/\tau^{su}, t)}{P_0^s(\tau^{su}, t)} (1 - H(\tau - \tau^{su})) \quad (\text{A.20})$$

Et la probabilité de rencontrer un obstacle de résistance inférieure ou égale à  $\tau$  s'écrit :



$$P_0^s(\tau, t) = \sum_{s \neq u} P^{su}(t) \left[ \frac{1 - H(\tau - \tau^{su})}{P_0^s(\tau^{su}, t)} + H(\tau - \tau^{su}) \right] \quad (\text{A.21})$$

Enfin, la densité d'obstacles sur le système ( $s$ ) est reliée à toutes les densités de dislocations sur les systèmes latents par une matrice d'interaction  $a^{su}$  dont les coefficients sont calculés à partir de considérations géométriques :

$$n^{su} = a^{su} \rho^u \quad \text{avec} \quad a^{su} = a_0 \frac{2}{\pi} \sqrt{1 - (m^s m^u)} \quad (\text{A.22})$$

$m^s$  et  $m^u$  définissent respectivement les normales unitaires aux plans de glissement ( $s$ ) et ( $u$ ).

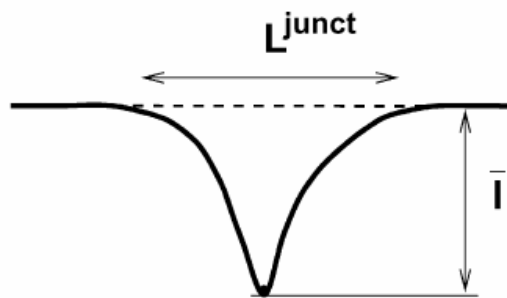
Quant au terme  $\tau^{su}$ , il est calculé à partir des énergies de formation de jonctions entre les dislocations appartenant aux différents systèmes :

$$E_{jog}^{su} = bU_{screw} [1 - r \cos \theta^{su}] \quad \text{si les systèmes } (s) \text{ et } (u) \text{ sont colinéaires} \quad (\text{A.23})$$

$$E_{jog}^{su} = bU_{screw} [2r - \cos \theta^{su} - r \cos \theta^{su}] \quad \text{sinon} \quad (\text{A.24})$$

$r$  correspond au rapport  $U_{edge} / U_{screw}$  et  $\theta^{su}$  à l'angle entre les vecteurs de Burgers  $b^s$  et  $b^u$  : ces énergies permettent de déduire  $\tau^{su}$  en considérant que le désancrage est un phénomène activé thermiquement :

$$\frac{\tau^{su}}{\tau_0^{su}} = \frac{k_B T}{E_{jog}^{su}} \operatorname{arcsinh} \left[ \frac{\dot{\gamma}^s}{\dot{\gamma}_0^s} \exp \left( \frac{E_{jog}^{su}}{k_B T} \right) \right] \quad \text{avec} \quad \tau_0^{su} = \frac{E_{jog}^{su}}{b \bar{l}^s L^{junct}} \quad \text{et} \quad \dot{\gamma}_0^s = 2\rho^s b \bar{l}^s v_D \quad (\text{A.25})$$



**Fig. A.3** : Illustration du phénomène de 'franchissement' d'une jonction

### c) Prise en compte de l'effet de la contrainte appliquée

En réalité la fonction  $f^s(\tau, t)$  dépend de la contrainte appliquée sur le système ( $s$ ), notée  $\tau^s(t)$ . En effet, la probabilité de trouver un obstacle ayant une cission critique inférieure à  $\tau^s(t)$  est

nulle car tous ces obstacles ont déjà été franchis avant l'instant  $t$ . La relation liant  $f^s(\tau, t)$  à  $\tilde{f}^s(\tau, t)$  est de la même forme que l'équation (A.19) :

$$f^s(\tau, t) = \frac{\tilde{f}^s(\tau, t)}{1 - \tilde{P}^s(\tau^s(t), t)} (1 - H(\tau - \tau^s(t))) \quad (\text{A.26})$$

Cette dernière équation permet de connaître l'évolution de la matrice d'écrouissage donnée par l'équation (I.96) du chapitre I, ce qui permet de disposer de toutes les informations nécessaires afin d'intégrer les lois du modèle :

$$h^s(t) = \frac{1}{\gamma_c^s(t)} \frac{(1 - P^s(\tau^s(t), t))}{f^s(\tau^s(t), t)} \quad (\text{A.27})$$

### A.1.c Loi d'écrouissage : évolution de la cission $\tau^s$ au cours de la déformation

Connaissant la fonction de répartition  $f^s(\tau, t)$  de la résistance  $\tau$  des obstacles au glissement, les auteurs ont proposé l'écriture d'une loi d'écrouissage en utilisant la relation d'Orowan :

$$\frac{d\gamma^s(t)}{dt} = \rho_m^s(t) b v_m^s(t) \quad (\text{A.28})$$

Dans laquelle  $\rho_m^s(t)$  désigne la densité de dislocations mobiles sur le système ( $s$ ) et  $v_m^s(t)$  la vitesse de ces mêmes dislocations. La distance moyenne parcourue par des dislocations mobiles avant de s'ancrer à nouveau sur un obstacle vaut  $\bar{N}^s(t) \bar{l}^s(t)$ , d'où :

$$v_m^s(t) = \frac{\bar{N}^s(t) \bar{l}^s(t)}{dt} \quad (\text{A.29})$$

Où  $\bar{N}^s(t)$  correspond au nombre d'obstacles moyen que la dislocation franchit entre 2 phases d'arrêt, et  $\bar{l}^s(t)$  la distance inter obstacles. Les auteurs postulent une fonction de répartition des obstacles sur le système ( $s$ ), de sorte que  $\bar{l}^s(t)$  vaut :

$$\bar{l}^s(t) = \frac{l}{2\sqrt{n^s(t)}} \quad (\text{A.30})$$

De même, ils montrent par des considérations probabilistes que le nombre d'obstacles  $\bar{N}^s(t)$  rencontrés par la dislocation avant immobilisation sur des arbres de la forêt dont la résistance est supérieure à  $\tau^s(t + dt)$  vaut :

$$\bar{N}^s(t) = \frac{1}{1 - \tilde{P}^s(\tau^s(t), t)} \quad (\text{A.31})$$

D'autre part, il est possible d'exprimer  $\rho_m^s(t)$  à partir de la fonction densité de probabilité  $f^s(\tau^s(t), t)$ , qui correspond par définition à la fraction de lignes de dislocations bloquées à l'instant  $t$  sur des obstacles de résistance  $\tau^s(t)$ . Par conséquent, une fraction  $df^s(\tau^s(t), t)$  de lignes de dislocations va pouvoir se libérer de ces obstacles entre  $t$  et  $t + dt$ . En multipliant cette fraction par la densité de dislocations totale  $\rho^s(t)$ , on obtient la densité de dislocations mobiles  $\rho_m^s(t)$  :

$$\rho_m^s(t) = \rho^s(t) df^s(\tau^s(t), t) = \rho^s(t) f^s(\tau^s(t), t) \dot{\tau}^s(t) dt \quad (\text{A.32})$$

En y introduisant les équations (I.90) et (I.93), la relation d'Orowan devient :

$$\frac{d\gamma^s(t)}{dt} = \rho^s(t) b f^s(\tau^s(t), t) \dot{\tau}^s(t) \bar{N}(t) \bar{l}(t) \quad (\text{A.33})$$

En s'aidant des relations (I.91) et (I.92), l'équation (I.93) peut donc être réécrite sous la forme  $\dot{\tau}^s(t) = h^s(t) \dot{\gamma}^s(t)$  avec :

$$h^s(t) = \frac{1}{\gamma_c^s(t)} \frac{(1 - P^s(\tau^s(t), t))}{f^s(\tau^s(t), t)} \quad (\text{A.34})$$

et  $\gamma_c^s(t)$  défini par:

$$\gamma_c^s(t) = \frac{b\rho^s(t)}{2\sqrt{n^s(t)}} \quad (\text{A.35})$$

Cette loi relie l'incrément de cisssion critique nécessaire pour activer le système ( $s$ ) à l'écoulement sur ce même système. Les termes d'écrouissage latent sont donc nuls. On peut toutefois remarquer que la matrice d'écrouissage est fonction de la densité d'obstacles  $n^s(t)$  qui dépend de l'activation des systèmes latents.

#### A.1.d Loi d'évolution des densités de dislocations $\rho^s$

Plusieurs mécanismes susceptibles de créer ou d'annihiler des dislocations sont considérés :

- production de dislocations par double glissement dévié (CS : cross slip)
- production de dislocations par sources de Frank Read (FR : Franck Read)
- annihilation de dislocations de vecteur de Burgers opposés (PA : pair annihilation)

L'évolution de  $\rho_s$  résulte de la combinaison entre ces 3 mécanismes élémentaires :

$$\dot{\rho}^s = \dot{\rho}_{CS}^s + \dot{\rho}_{FR}^s + \dot{\rho}_{PA}^s \quad (\text{A.36})$$

La production de dislocations par double glissement dévié est donnée par :

$$b\dot{\rho}_{CS}^s = \lambda_{CS} \sqrt{\rho^s} \dot{\gamma}^s \quad (\text{A.37})$$

Le terme  $\lambda_{CS}$  est activé thermiquement. Il s'écrit sous la forme :

$$\lambda_{CS} = \frac{L^{sat}}{L^{cross}} \exp\left[-\frac{E^{cross}}{k_B T}\right] \quad (\text{A.38})$$

$E^{cross}$  désignant l'énergie d'activation du mécanisme de glissement dévié,  $L^{sat}$  la longueur de lignes de dislocations émises par chaque source jusqu'à saturation, et  $L^{cross}$  la longueur moyenne des segments déviés.

La contribution des sources de Frank Read dans le terme de production de dislocations s'écrit :

$$b\dot{\rho}_{FR}^s = \lambda_{FR} \sqrt{\rho^s} \dot{\gamma}^s \quad (\text{A.39})$$

Classiquement, le taux d'annihilation des dislocations suit un loi du type de celle proposée par Essman et Mughrabi :

$$b\dot{\rho}_{PA}^s = -\kappa \rho^s \dot{\gamma}^s \quad (\text{A.40})$$

La loi d'évolution de  $\rho^s$  est donc de la forme :

$$b\dot{\rho}^s = \lambda \sqrt{\rho^s} \dot{\gamma}^s - \kappa \rho^s \dot{\gamma}^s \quad (\text{A.41})$$

On note qu'il n'y pas de couplage entre l'évolution des densités de dislocation sur le système considéré et les systèmes latents, ce qui se traduit par l'existence d'une valeur de saturation  $\rho^{sat}$  :

$$\rho^{sat} = \left(\frac{\lambda}{\kappa}\right)^2 \quad (\text{A.42})$$

Cette saturation des densités de dislocations sur les systèmes actifs conduit bien entendu à une saturation de la matrice d'écrouissage, à la différence des modèles de type Tabourot et *al.*, pour lesquels l'évolution de la densité de dislocations sur un système est couplée à la densité d'obstacles, et donc à la densité de dislocations sur tous les autres systèmes.

## A.2 Similitudes entre l'approche probabiliste de Stainier et le modèle de Rauch

L'objectif de ce sous-chapitre est de montrer qu'à partir de l'équation (A.9) du modèle de Stainier, on peut retrouver la loi d'écroutissage proposée dans le modèle de Rauch [RAU93], alors que les deux modèles font appel à des considérations différentes.

L'équation (A.9) est rappelée ci-dessous :

$$\tau^s \geq \tau = \tau_{eff}^{screw} + \frac{2U^{edge}}{bl_s} \quad (A.43)$$

Cette équation exprime la cission appliquée comme étant la somme de la contrainte de Peierls et de la tension de ligne. En explicitant le terme de tension de ligne, on démontre que l'on retrouve l'expression de la loi d'écroutissage du modèle de Rauch, bien que les hypothèses formulées sur la configuration de la dislocation épinglée sur l'obstacle ne soit pas les mêmes.

La cission critique  $\tau$ , qui peut être vue comme la contrainte d'écoulement plastique à l'échelle d'un obstacle, ne dépend de l'écroutissage qu'à travers la longueur  $l_s$  de dislocation vis séparant les deux points d'ancrage de l'obstacle : or cette distance correspond à  $L_0$  dans le modèle de Rauch, même si celui-ci considère non pas une partie vis et une partie coin, mais une partie vis et une partie mixte qui se courbe autour des points d'ancrage.

Louchet *et al.* ont établi que l'aire balayée  $l_s x_c$  lors de l'avancée du segment vis par rapport à l'obstacle était reliée à la densité d'obstacles [LOU78], donc à  $\rho_F \approx \rho$  par la relation :

$$l_s x_c = \frac{l}{\rho_F} \quad (A.44)$$

$x_c$  correspond à la distance critique d'avancée pour laquelle il y a franchissement de l'obstacle. On peut donc réécrire la cission critique  $\tau$  sous la forme :

$$\tau = \tau_{eff}^{screw} + \frac{2U^{edge} x_c \rho}{b} \quad (A.45)$$

Or si, comme pour le modèle de Rauch, on fait l'hypothèse de l'existence d'un segment mixte se courbant sous l'effet de la contrainte appliquée  $\tau$ , le rayon critique de courbure  $R_c$  vaut :

$$R_c = \frac{\mu b}{\tau} \quad (A.46)$$

$x_c$  étant relié géométriquement à  $R_c$  via l'angle critique  $\phi$  de courbure dessiné par le segment mixte juste avant le franchissement de l'obstacle :

$$x_c = R_c (1 - \sin\phi) \quad (A.47)$$

En intégrant les équations (A.46) et (A.47) dans la relation (A.45), on retrouve une expression de la forme :

$$\tau = \tau_{eff}^{screw} + \frac{2\mu U_{edge}(1 - \sin \varphi)\rho}{\tau} \quad (A.48)$$

En prenant la constante  $\alpha$  égale à :

$$\alpha = \frac{2U_{edge}(1 - \sin \varphi)}{b} \quad (A.49)$$

L'équation (A.48) peut être ré-écrite sous la forme :

$$\tau = \tau_{eff}^{screw} + \frac{\alpha\mu\beta\rho}{\tau} \quad (A.50)$$

Cette expression de  $\tau$  est presque identique à celle utilisée dans le modèle de Rauch. Seule l'expression du terme a diffère par rapport à celle établie par Rauch. La résolution de l'équation (A.50) conduit à l'expression de la contrainte d'écoulement  $\tau$  :

$$\tau = \frac{\tau_p^{screw}}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{\tau_p^{screw^2} + 4(\alpha\mu\beta)^2 \rho} \quad (A.51)$$

Finalement, nous retrouvons bien l'expression (II.61) du modèle de Rauch donnant la cission d'écoulement en fonction de  $\rho$  et de la contrainte effective  $\tau_p^{screw}$ . Ce calcul suggère l'existence de points communs entre les 2 approches : celles-ci conduisent à des lois d'écrouissage très similaires, du moins à l'échelle de l'obstacle pris indépendamment. Toutefois, le modèle de Stainier *et al.* fait appel à une approche statistique pour passer du mécanisme élémentaire à l'écrouissage d'un élément de volume monocristallin. Cette démarche est très lourde et très consommatrice de paramètres matériau, ce qui la rend très difficile à utiliser dans le cadre de la simulation d'un polycristal. Le modèle de Rauch propose une description plus intuitive du mécanisme élémentaire d'écrouissage ainsi que de la transition 'haute / basse' température. Il n'intègre cependant pas autant d'informations en ce qui concerne le passage de l'échelle de la dislocation à celle du monocristal.



## Annexe B

### **Essais mécaniques de traction simple, de sauts de vitesse et de sauts de température**



## TABLE DES MATIERES

### **B. Essais mécaniques de traction simple, de sauts de vitesse et de sauts de température**

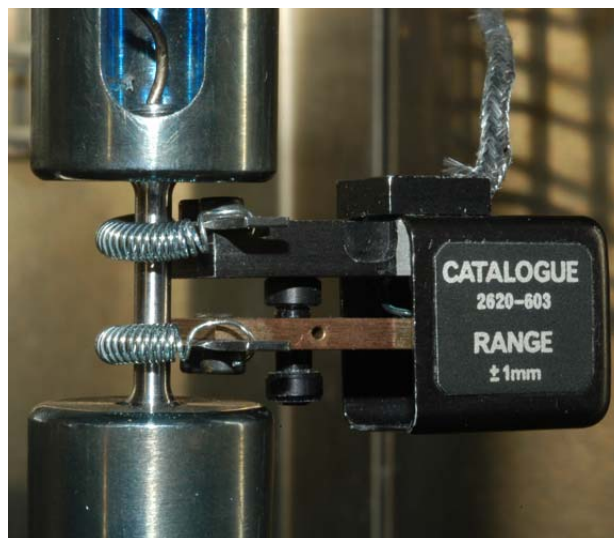
<b>B.1</b>	<b>Essais de traction simple .....</b>	<b>257</b>
<i>B.1.a</i>	<i>Montage.....</i>	<i>257</i>
<i>B.1.b</i>	<i>Courbes de traction simple à <math>T=0^{\circ}\text{C}</math>, <math>25^{\circ}\text{C}</math> et <math>100^{\circ}\text{C}</math>.....</i>	<i>258</i>
<i>B.1.c</i>	<i>Valeurs de <math>R_{p0,2}</math>, <math>R_m</math>, <math>A_g</math>, <math>A_t</math>.....</i>	<i>259</i>
<i>B.1.d</i>	<i>Identification de relations <math>R_{p0,2} = f(T)</math> et <math>R_m = f(T)</math>.....</i>	<i>260</i>
<i>B.1.e</i>	<i>Courbes conventionnelles à <math>T = 25^{\circ}\text{C}</math>, <math>-90^{\circ}\text{C}</math>, <math>-150^{\circ}\text{C}</math> et <math>-196^{\circ}\text{C}</math>.....</i>	<i>261</i>
<i>B.1.f</i>	<i>Etude fractographique.....</i>	<i>263</i>
<b>B.2</b>	<b>Essais de sauts de vitesse et sauts de température.....</b>	<b>266</b>
<i>B.2.a</i>	<i>Essais de sauts de vitesse .....</i>	<i>266</i>
<i>B.2.b</i>	<i>Essais de sauts de température .....</i>	<i>268</i>

## B.1 Essais de traction simple

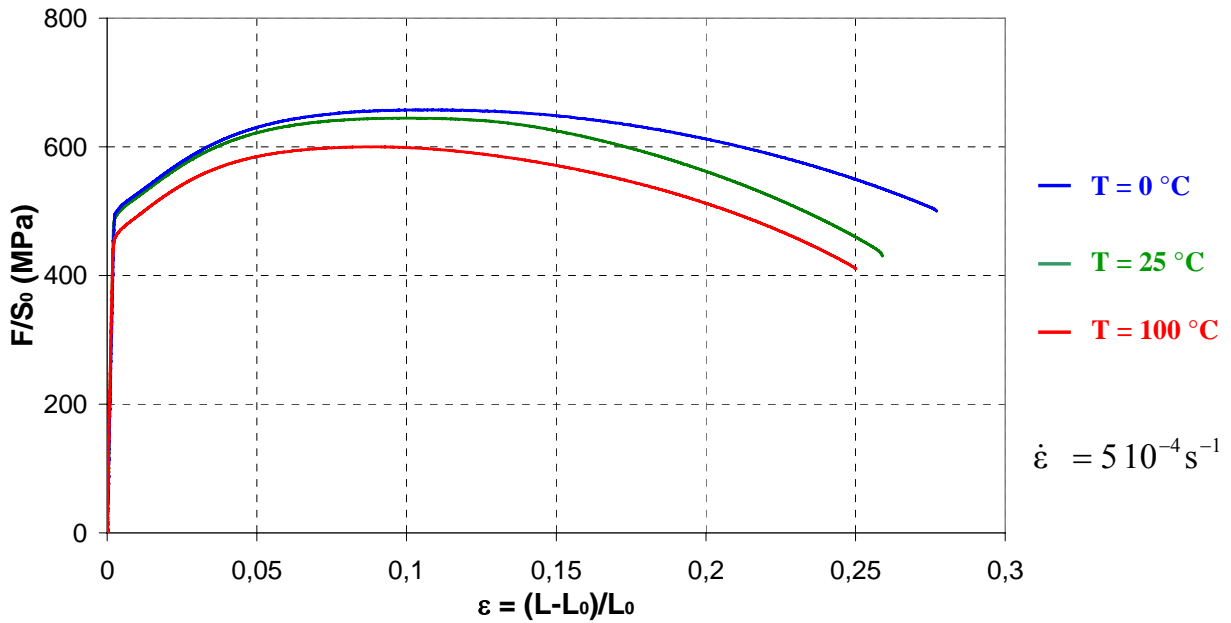
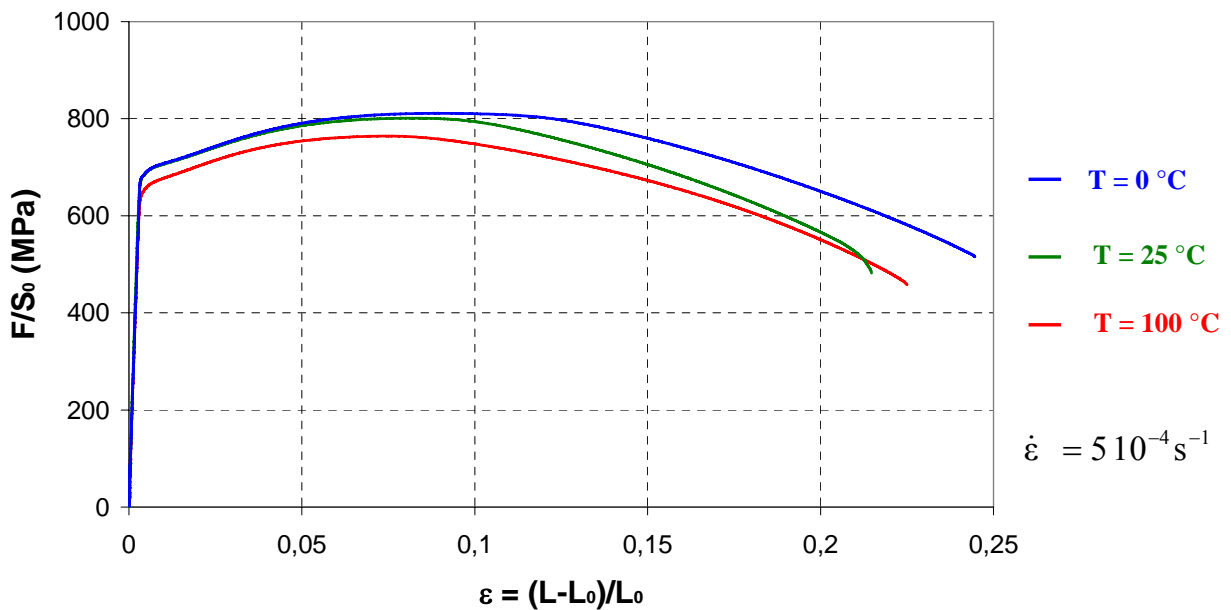
### B.1.a Montage



**Fig. B.1** : Schéma du montage de traction simple : vue d'ensemble



**Fig. B.2** : Montage de l'extensomètre sur l'éprouvette

**B.1.b Courbes de traction simple à T=0°C, 25°C et 100°C****Fig. B.3 :** Courbes de traction conventionnelles à 0°C, 25°C et 100°C (bainite)**Fig. B.4 :** Courbes de traction conventionnelles à 0°C, 25°C et 100°C (bainite)

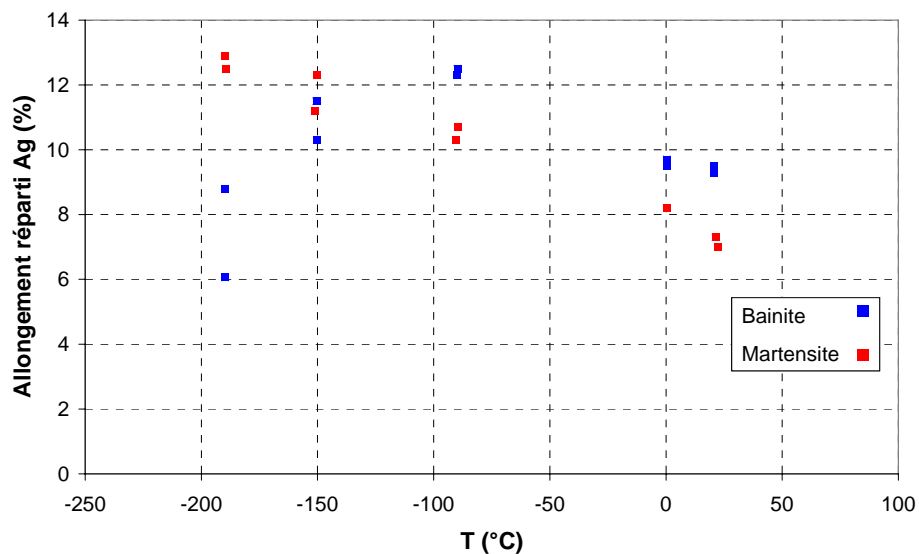
B.1.c Valeurs de  $R_{p0,2}$ ,  $R_m$ ,  $A_g$ ,  $A_t$ 

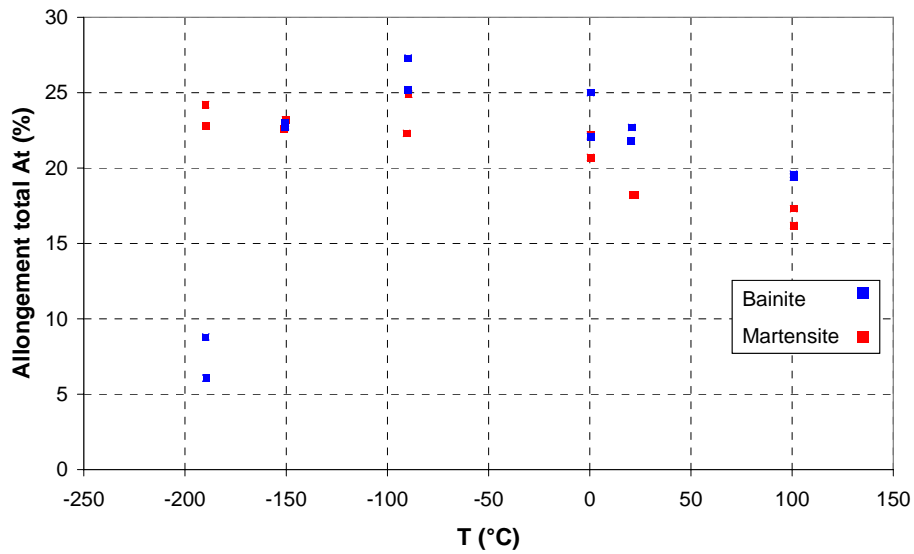
n° éprouvette	T <sub>visée</sub> (°C)	T <sub>moy</sub> (°C)	R <sub>p0,2</sub> (MPa) traverse	R <sub>p0,2</sub> (MPa) extensomètre	R <sub>m</sub> (MPa)	A <sub>g</sub> (%)	A <sub>t</sub> (%)	φ <sub>o</sub> mesuré (mm)
262--R16	-196	-189,7	977	973	1036	8,8	8,8	3,021
262--R17	-196	-189,6	978	976	1019	6,06	6,06	3,02
262--R11	-150	-150,4	723	721	855	11,5	22,8	3,017
262--R12	-150	-150,4	760	756	894	10,3	23	3,011
262--R13	-150	-150,5	730	729	862	11,5	22,7	3,009
262--R05	-90	-89,9	590	591	757	12,3	25,2	3,015
262--R06	-90	-89,8	591	591	753	12,5	27,3	3,012
262--R09	0	0,4	508	506	658	9,7	25	3,02
262--R10	0	0,4	509	507	658	9,5	22,1	3,015
262--R01	20	20,6	501	500	645	9,3	21,8	3,02
262--R02	20	20,8	499	498	643	9,5	22,7	3,019
262--R07	100	100,7	468	468	600	8	19,4	3,016
262--R08	100	100,7	471	469	603	8,2	19,6	3,013

Tableau B.1 : Récapitulatif des essais de traction simple (bainite)

n° éprouvette	T <sub>visée</sub> (°C)	T <sub>moy</sub> (°C)	R <sub>p0,2</sub> (MPa) traverse	R <sub>p0,2</sub> (MPa) extensomètre	R <sub>m</sub> (MPa)	A <sub>g</sub> (%)	A <sub>t</sub> (%)	φ <sub>o</sub> mesuré (mm)
262--M35	-196	-189,8	1129	1128	1172	12,9	24,2	3,02
262--M36	-196	-189,5	1125	1125	1166	12,5	22,8	3,021
262--M31	-150	-150,3	892	892	1002	12,3	23,2	3,018
262--M32	-150	-151,2	893	881	1003	11,2	22,6	3,015
262--M24	-90	-90,5	782	781	916	10,3	22,3	3,02
262--M23	-90	-89,5	775	775	911	10,7	24,9	3,019
262--M29	0	0,4	693	692	811	8,2	20,7	3,02
262--M30	0	0,4	689	686	806	8,2	22,2	3,02
262--M21	20	21,3	690	689	801	7,3	18,2	3,015
262--M22	20	22,4	687	685	796	7	18,2	3,015
262--M27	100	100,7	661	659	764	6,4	17,3	3,019
262--M28	100	100,8	653	654	759	6,2	16,2	3,02

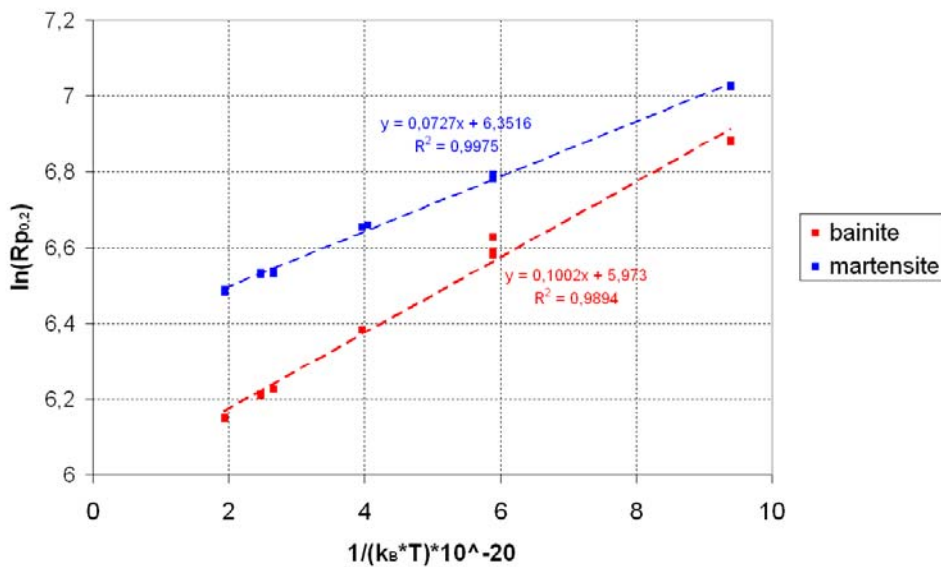
Tableau B.2 : Récapitulatif des essais de traction simple (martensite)

Fig. B.5 : Evolution de l'allongement réparti  $A_g$  (%) en fonction de  $T$  dans la bainite et la martensite



**Fig. B.6 :** Evolution de l'allongement réparti  $A_g$  (%) en fonction de  $T$  dans la bainite et la martensite

**B.1.d Identification de relations  $R_{p0,2} = f(T)$  et  $R_m = f(T)$**



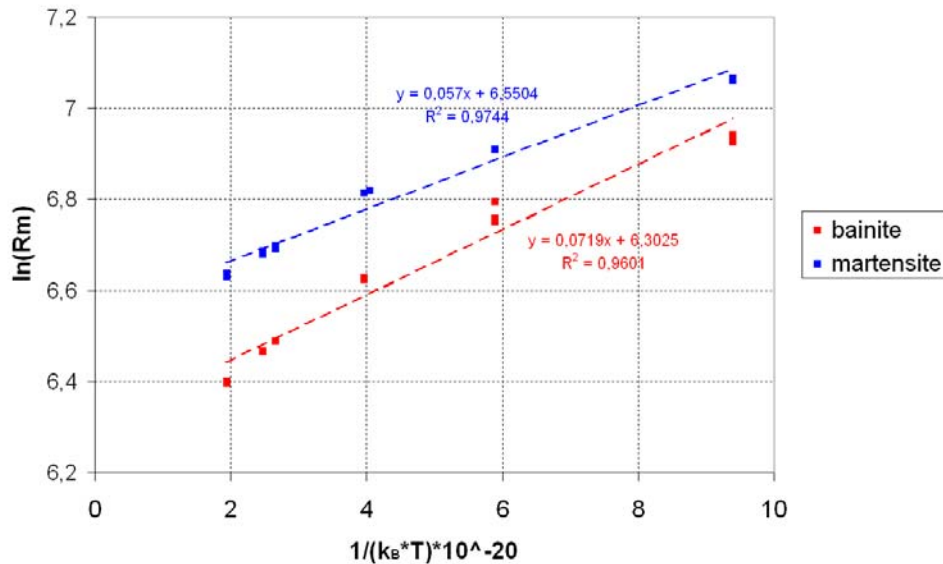
**Fig. B.7 :** Identification de  $R_{p0,2}^0$  et  $E_1$  sur les valeurs expérimentales de  $R_{p0,2}$

$R_{p0,2}^0 = 393$  MPa,  $E_1 = 1,00 \cdot 10^{-21}$  J (bainite) /  $R_{p0,2}^0 = 573$  MPa,  $E_1 = 7,27 \cdot 10^{-22}$  J (martensite)

L'évolution de la limite élastique à 0,2 %  $R_{p0,2}$  et de la résistance à la traction  $R_m$  peuvent être décrites par une loi empirique du type :

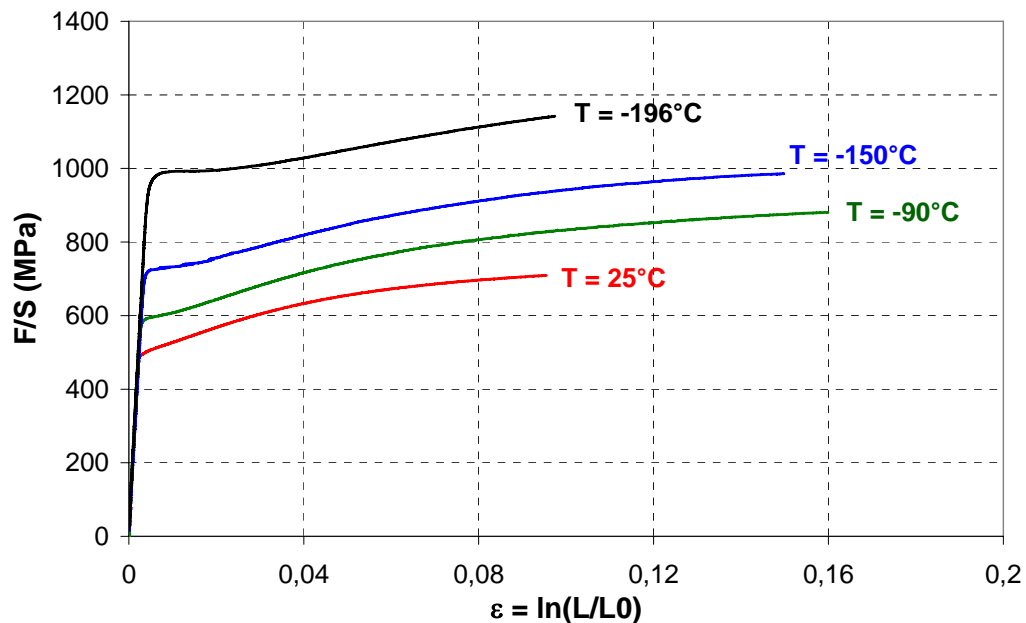
$$R_{p0,2} = R_{p0,2}^0 \exp\left[-\frac{E_1}{k_B T}\right] \quad \text{et} \quad R_m = R_m^0 \exp\left[-\frac{E_2}{k_B T}\right] \quad (\text{B.1})$$

Les résultats, résumés sur les 2 courbes ci-dessous, montrent que cette loi décrit l'évolution de  $R_{p0,2}$  et  $R_m$  pour l'ensemble du domaine de température.

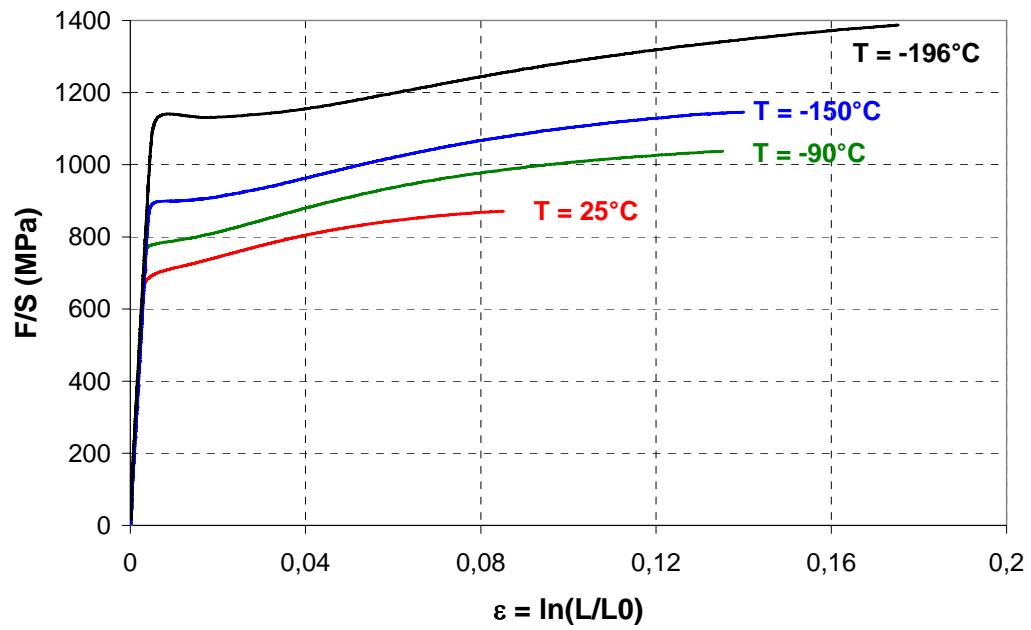


**Fig. B.8 :** Identification de  $R_m^0$  et  $E_2$  sur l'évolution des valeurs expérimentales de  $R_m$   
 $R_m^0 = 546$  MPa,  $E_2 = 7,19 \cdot 10^{-22}$  J (bainite) /  $R_m^0 = 700$  MPa,  $E_2 = 5,70 \cdot 10^{-22}$  J (martensite)

### B.1.e Courbes conventionnelles à $T = 25^\circ\text{C}$ , $-90^\circ\text{C}$ , $-150^\circ\text{C}$ et $-196^\circ\text{C}$



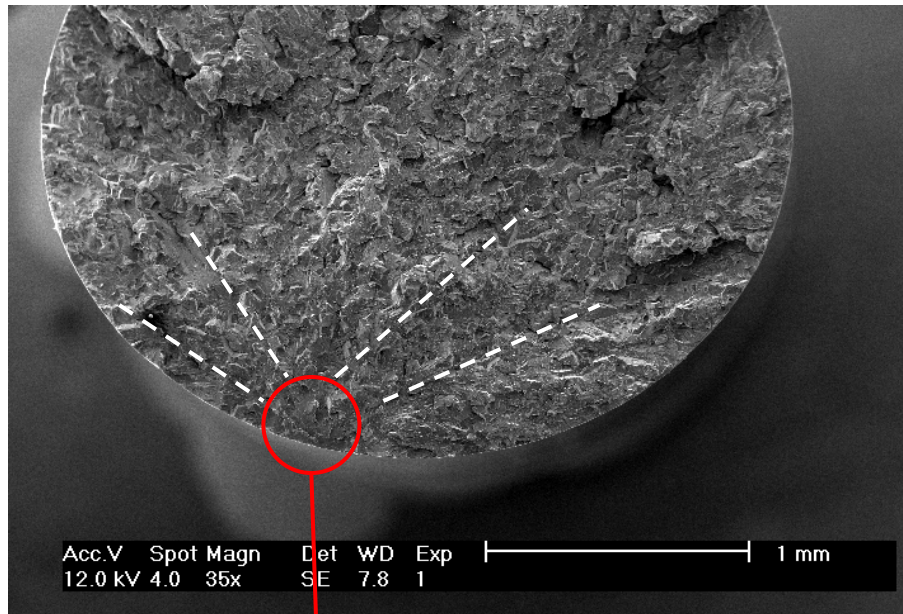
**Fig. B.9 :** Courbes de traction rationnelles à  $T = 25^\circ\text{C}$ ,  $-90^\circ\text{C}$ ,  $-150^\circ\text{C}$  et  $-196^\circ\text{C}$  (bainite)



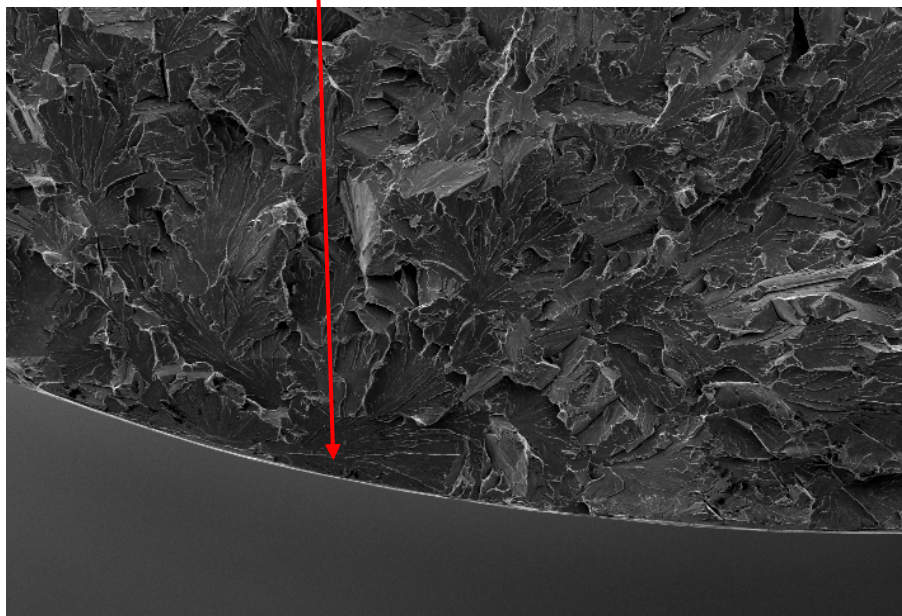
**Fig. B.10** : Courbes de traction rationnelles à  $T = 25^\circ\text{C}$ ,  $-90^\circ\text{C}$ ,  $-150^\circ\text{C}$  et  $-196^\circ\text{C}$  (martensite)

### B.1.f Etude fractographique

Une macrographie a été réalisée afin de localiser le site d'amorçage de la rupture brutale par clivage dans l'éprouvette bainitique R16 (figure B.11). L'ensemble du faciès a ensuite été balayé avec un grandissement plus élevé. Les rivières de clivage semblent converger vers un point situé au bord de l'éprouvette (figure B.12). Une légère entaille à la surface de l'éprouvette (traces laissées par les pattes de l'extensomètre) semble être à l'origine de concentrations de contraintes qui ont permis l'amorçage de la rupture.

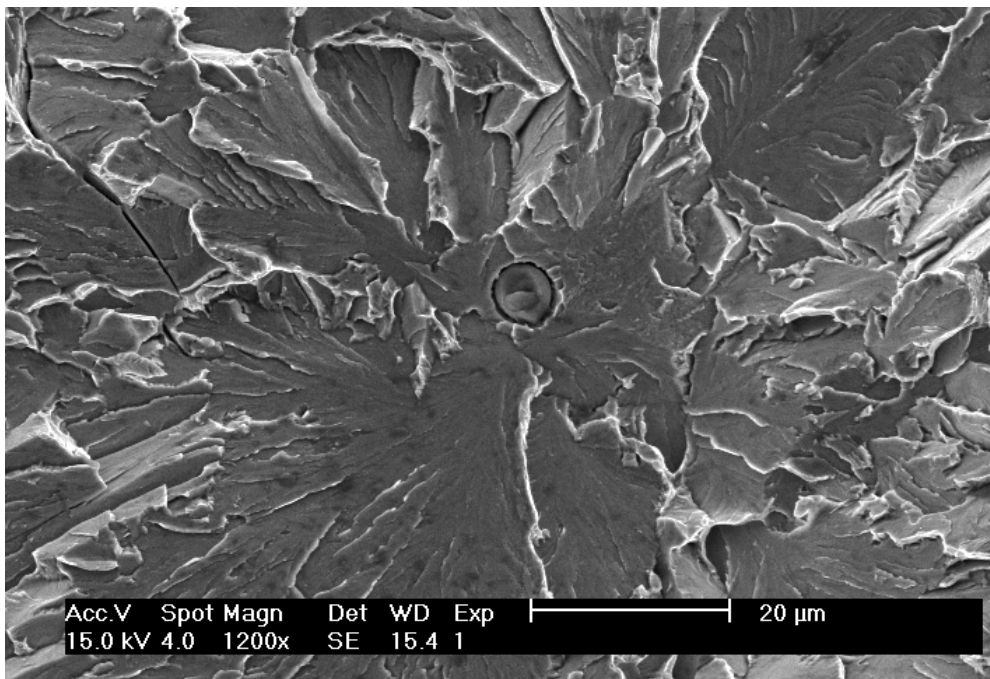


**Fig. B.11** : Macrographie de l'éprouvette bainitique rompue à -196°C

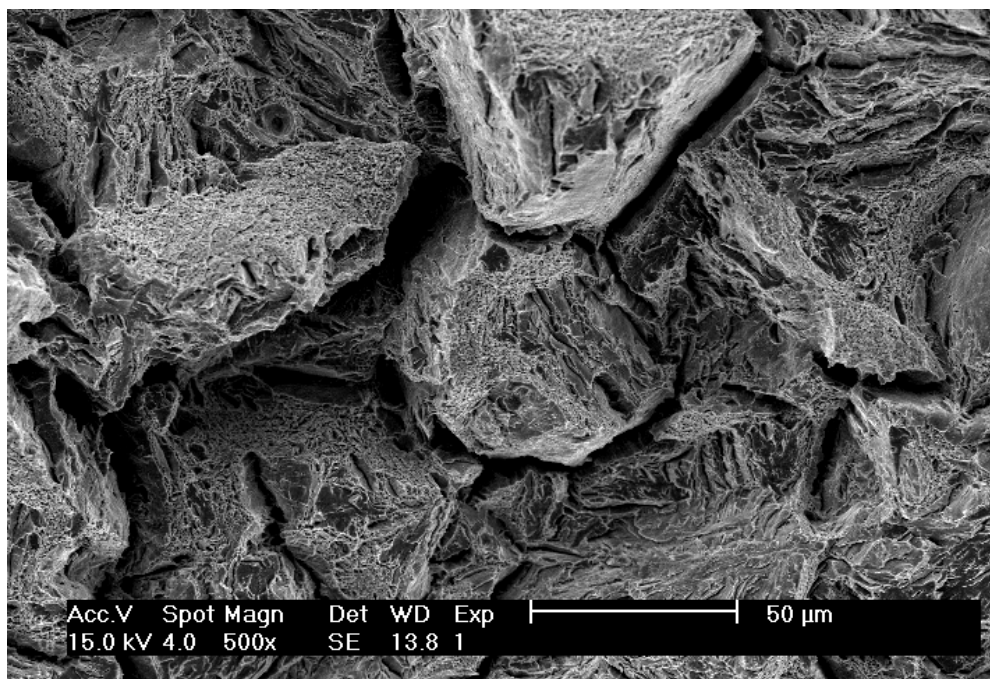


**Fig. B.12** : Localisation de l'amorçage de la rupture par clivage

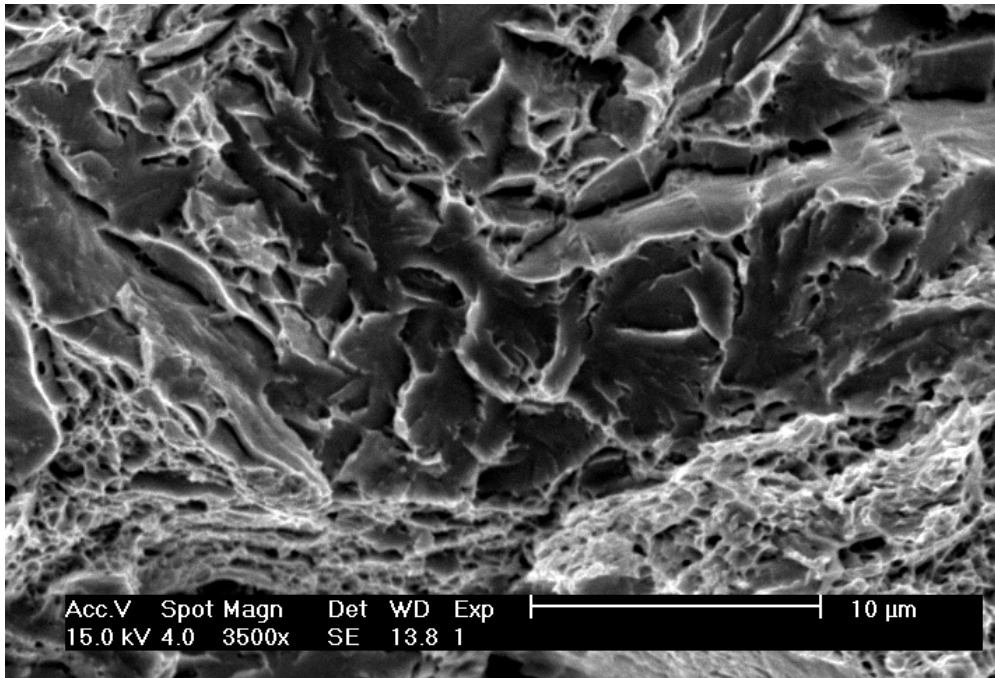




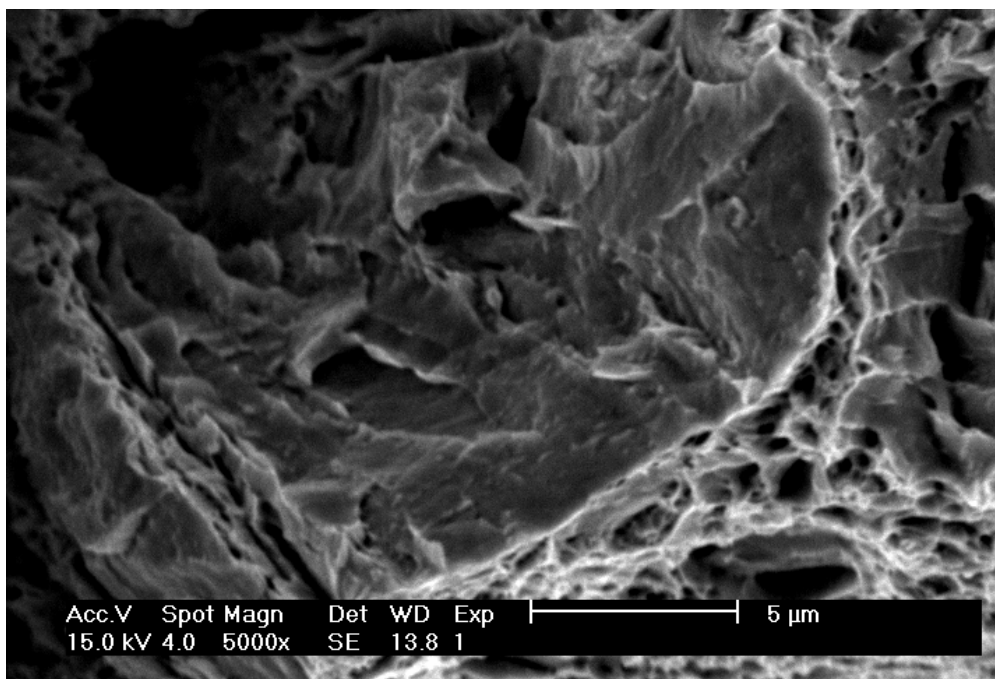
**Fig. B.13 :** Bainite -196°C / réamorçage local sur une particule de MnS



**Fig. B.14 :** Martensite -196°C / mise en évidence de la microstructure



**Fig. B.15 :** Martensite -196°C / mise en évidence de zones rompues par clivage



**Fig. B.16 :** Martensite -196°C / présence de faciès de décohésion intergranulaire

Les figures B.15 et B.16 montrent la présence à la fois de cupules traduisant une rupture ductile et de facettes caractéristiques d'une rupture par clivage, ce qui n'est pas observé sur le matériau bainitique à -196°C. La figure B.17 montre la présence assez localisée de faciès de décohésion intergranulaire qui sont reconnaissables à l'aspect irrégulier de la surface, à l'absence de rivières ainsi qu'à la présence de carbures laissant un relief à la surface

## B.2 Essais de sauts de vitesse et sauts de température

### B.2.a Essais de sauts de vitesse

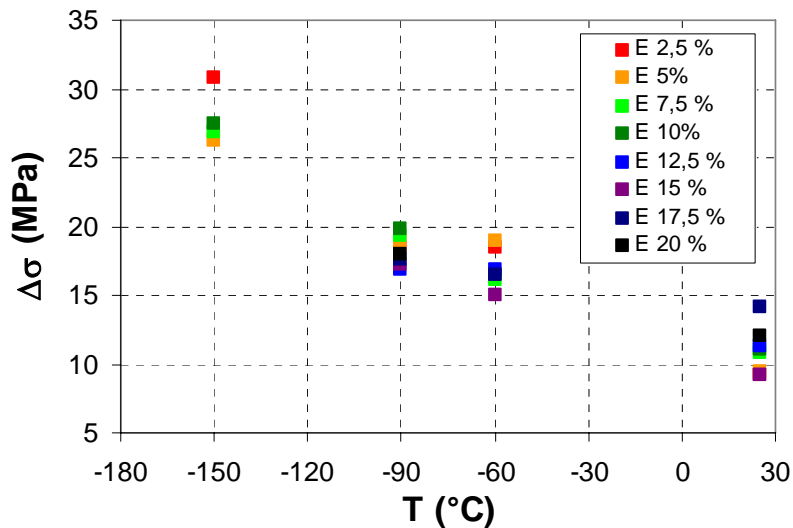
#### a) Valeurs de $\Delta\sigma$

		valeur de déformation $\varepsilon = u/L0$							
		2,5 %	5 %	7,5 %	10 %	12,5 %	15 %	17,5 %	20 %
T (K)	293	9	9	11	11	11	9	14	12
	213	18	19	16	17	17	15	16	
	183	18	19	19	20	17	17	18	18
	123	31	26	27	28				

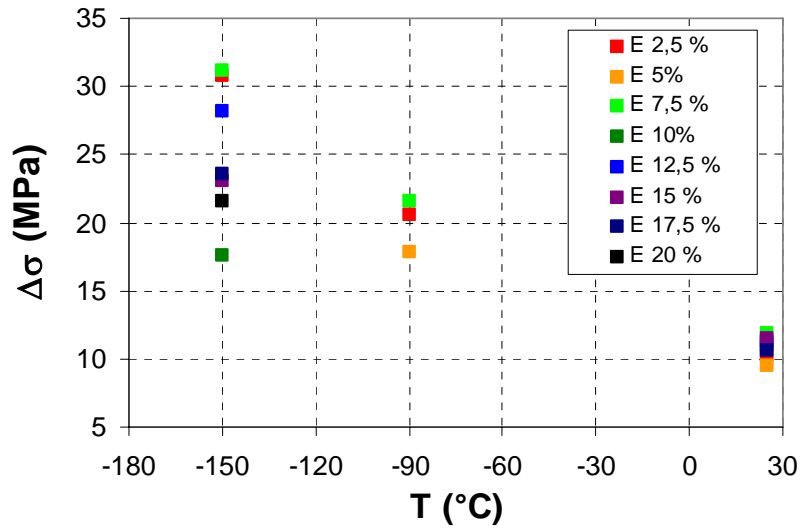
**Tableau B.3 :** Amplitude des sauts  $\Delta\sigma$  (bainite)

		valeur de déformation $\varepsilon = u/L0$							
		2,5 %	5 %	7,5 %	10 %	12,5 %	15 %	17,5 %	20 %
T (°C)	25	10	9	12	11	11	11	11	
	-90	20	18	22					
	-150	31	23	31	18	28	23	23	22

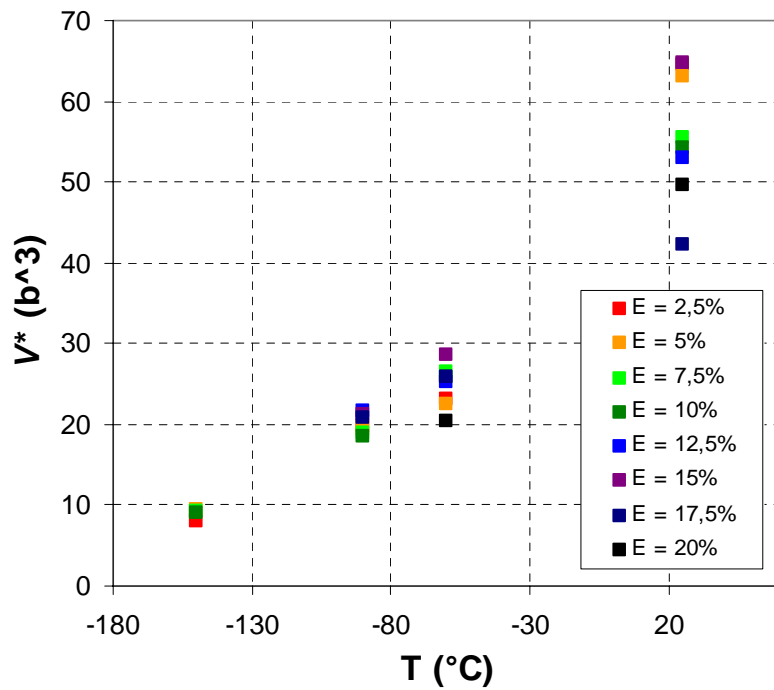
**Tableau B.4 :** Amplitude des sauts  $\Delta\sigma$  (bainite)



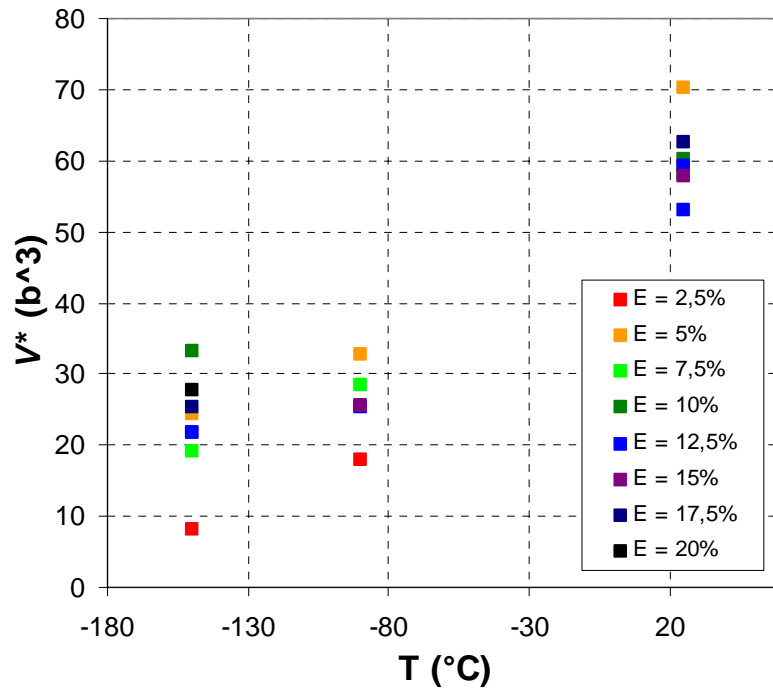
**Fig. B.17 :** Evolution de  $\Delta\sigma$  en fonction de  $T$  pour différentes valeurs de  $\varepsilon$  (bainite)



**Fig. B.18 :** Evolution de  $\Delta\sigma$  en fonction de  $T$  pour différentes valeurs de  $\varepsilon$  (martensite)



**Fig. B.19 :** Evolution du volume d'activation  $V^*$  en fonction de  $T$  pour différentes valeurs de  $\varepsilon$  (bainite)



**Fig. B.20 :** Evolution du volume d'activation  $V^*$  en fonction de  $T$  pour différentes valeurs de  $\varepsilon$  (martensite)

### B.2.b Essais de sauts de température

		valeur de déformation $\varepsilon = u/LO$			
		2,5 %	5 %	7,5 %	10 %
T (°C)	0 / 37	1,38	0,80	1,03	0,83
	-196 / -150	0,44	0,42	0,41	0,38

**Tableau B.5 :** Valeurs de  $\Delta G$  calculées à partir des sauts de vitesse et de température (bainite)

		valeur de déformation $\varepsilon = u/LO$			
		2,5 %	5 %	7,5 %	10 %
T (°C)	0 / 37	1,39	0,97	1,22	1,08
	-196 / -150	0,42	0,45	0,34	0,55

**Tableau B.6 :** Valeurs de  $\Delta G$  calculées à partir des sauts de vitesse et de température (martensite)

## Annexe C

### **Essais de ténacité et analyse fractographique des éprouvettes CT**

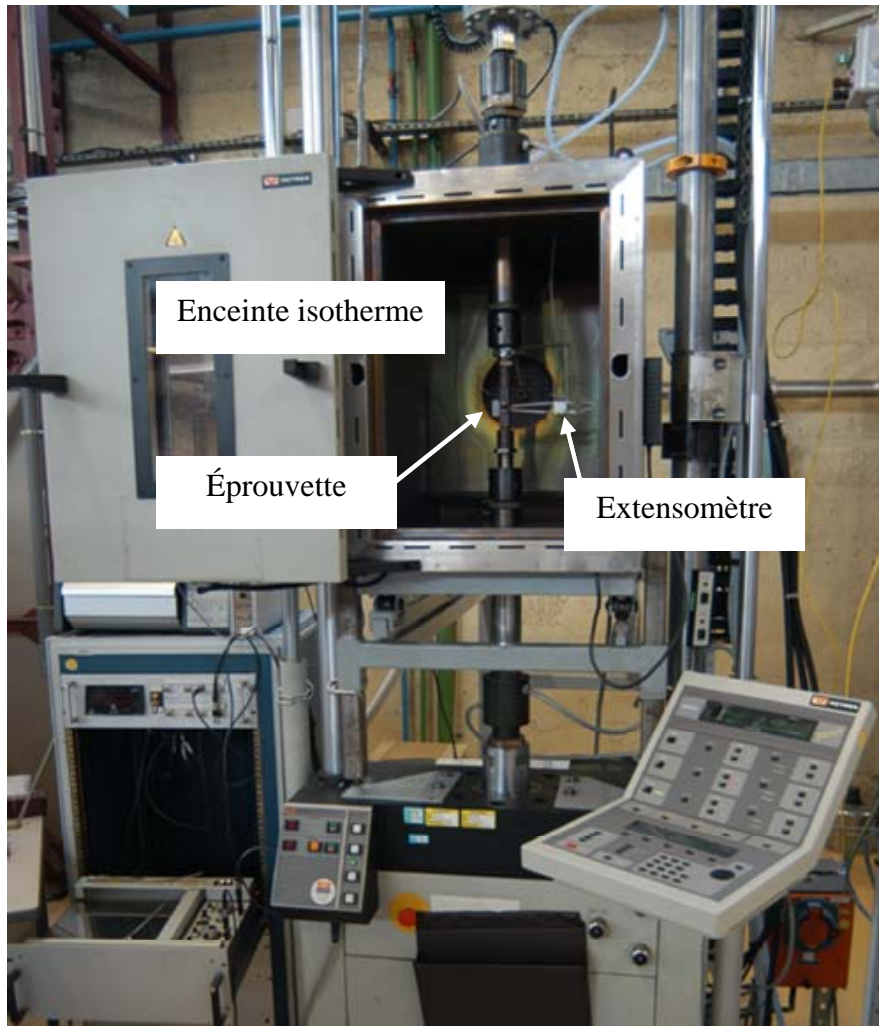
## TABLE DES MATIÈRES

### C. Essais de ténacité et analyse fractographique des éprouvettes CT

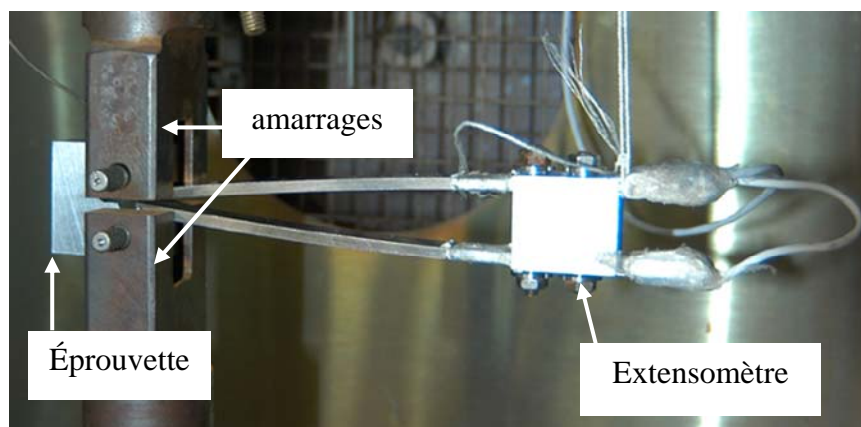
<b>C.1</b>	<b>Résultats des essais de ténacité.....</b>	<b>271</b>
<i>C.1.a</i>	<i>Schéma du montage.....</i>	<i>271</i>
<i>C.1.b</i>	<i>Mesures de <math>a_0</math>.....</i>	<i>272</i>
<i>C.1.c</i>	<i>Courbes force / ouverture <math>F = f(\delta)</math>.....</i>	<i>274</i>
<i>C.1.d</i>	<i>Calcul de <math>K_{JC}</math>.....</i>	<i>278</i>
<b>C.2</b>	<b>Etude fractographique.....</b>	<b>279</b>
<i>C.2.a</i>	<i>Bainite / <math>T = -60^\circ\text{C}</math>.....</i>	<i>279</i>
<i>C.2.b</i>	<i>Bainite / <math>T = -90^\circ\text{C}</math>.....</i>	<i>280</i>
<i>C.2.c</i>	<i>Bainite / <math>T = -120^\circ\text{C}</math>.....</i>	<i>281</i>
<i>C.2.d</i>	<i>Martensite / <math>T = -90^\circ\text{C}</math>.....</i>	<i>283</i>
<i>C.2.e</i>	<i>Martensite / <math>T = -120^\circ\text{C}</math>.....</i>	<i>284</i>
<i>C.2.f</i>	<i>Martensite / <math>T = -142^\circ\text{C}</math>.....</i>	<i>285</i>

## C.1 Résultats des essais de ténacité

### C.1.a Schéma du montage



**Fig. C.1 :** Vue d'ensemble du montage des essais de ténacité



**Fig. C.2 :** Montage de l'éprouvette et de l'extensomètre



Annexe C : essais de ténacité et analyse fractographique

**C.1.b Mesures de  $a_0$**

N° epr	a1	a2	a3	a4	a5	a6	a7	a8	a9	a0	critère 1 : $0,45 < a_0/W < 0,70$	critère 2 : $\max(ai) - 1,1*a_0 < 0$	critère 3 : $\min(ai) - 0,9*a_0 > 0$	critère 4 : $\min(ai) - (1,3+ae) > 0$
N20-B	13,86	14,14	14,17	14,13	14,15	13,99	13,85	13,68	13,30	13,96	0,56	-1,19	0,73	2,05
N20-H	13,26	13,69	13,85	14,01	14,12	14,13	14,18	14,14	13,84	13,96	0,56	-1,17	0,70	2,01
N21-B	13,73	14,00	14,09	14,13	14,07	13,99	13,97	13,76	13,34	13,94	0,56	-1,21	0,79	2,09
N21-H	13,32	13,74	13,98	14,00	14,07	14,12	14,10	14,00	13,72	13,94	0,56	-1,22	0,77	2,07
N22-B	14,15	14,32	14,32	14,23	14,11	13,96	13,73	13,49	13,06	13,97	0,56	-1,05	0,49	1,81
N22-H	13,05	13,47	13,72	13,93	14,13	14,23	14,31	14,31	14,15	13,96	0,56	-1,05	0,48	1,80
N23-B	13,77	14,01	14,12	14,13	14,11	13,98	13,87	13,67	13,36	13,93	0,56	-1,19	0,82	2,11
N23-H	13,78	14,01	14,12	14,13	14,09	13,97	13,86	13,65	13,34	13,93	0,56	-1,19	0,81	2,09
N24-B	13,89	14,12	14,16	14,20	14,17	14,00	13,81	13,59	13,19	13,95	0,56	-1,15	0,64	1,94
N24-H	13,21	13,54	13,81	13,99	14,13	14,18	14,17	14,10	13,89	13,93	0,56	-1,14	0,67	1,96
N25-B	13,89	14,17	14,24	14,24	14,13	14,05	13,84	13,58	13,17	13,97	0,56	-1,13	0,59	1,92
N25-H	13,11	13,55	13,79	14,02	14,12	14,22	14,21	14,17	13,85	13,95	0,56	-1,12	0,56	1,86
N26-B	13,69	13,99	14,09	14,10	14,06	14,01	13,91	13,68	13,36	13,92	0,56	-1,22	0,83	2,11
N26-H	13,35	13,66	13,88	13,99	14,05	14,10	14,08	14,00	13,67	13,91	0,56	-1,20	0,83	2,10
N27-B	13,84	14,14	14,18	14,14	14,10	13,96	13,75	13,53	13,14	13,91	0,56	-1,12	0,62	1,89
N27-H	13,15	13,53	13,75	13,97	14,11	14,16	14,19	14,16	13,86	13,92	0,56	-1,12	0,62	1,90
N28-B	13,76	14,04	14,10	14,05	14,04	13,99	13,85	13,65	13,27	13,91	0,56	-1,19	0,76	2,02
N28-H	13,26	13,63	13,85	13,97	14,05	14,06	14,11	14,02	13,78	13,90	0,56	-1,18	0,75	2,01
N29-B	14,04	14,33	14,28	14,18	14,07	13,95	13,75	13,49	13,07	13,95	0,56	-1,02	0,51	1,82
N29-H	13,05	13,49	13,74	13,96	14,08	14,18	14,26	14,32	14,00	13,94	0,56	-1,02	0,50	1,80

N° epr	a1	a2	a3	a4	a5	a6	a7	a8	a9	a0	critère 1 : $0,45 < a_0/W < 0,70$	critère 2 : $\max(ai) - 1,1*a_0 < 0$	critère 3 : $\min(ai) - 0,9*a_0 > 0$	critère 4 : $\min(ai) - ae > 1,3$	validité
N30-B	13,90	14,22	14,25	14,19	14,10	13,97	13,80	13,57	13,19	13,95	0,56	-1,10	0,63	1,94	oui
N30-H	13,11	13,51	13,83	13,97	14,10	14,20	14,23	14,21	13,93	13,95	0,56	-1,11	0,56	1,86	a0 = 13,95
N31-B	13,08	13,51	13,81	13,93	14,06	14,16	14,17	14,08	13,75	13,89	0,56	-1,11	0,57	1,83	oui
N31-H	13,72	14,05	14,13	14,14	14,05	13,96	13,78	13,52	13,10	13,88	0,56	-1,13	0,61	1,85	a0 = 13,98
N32-B	13,25	13,60	13,80	13,98	14,08	14,18	14,20	14,12	13,92	13,94	0,56	-1,14	0,71	2,00	oui
N32-H	13,86	14,09	14,11	14,14	14,10	14,01	13,78	13,58	13,24	13,92	0,56	-1,18	0,71	1,99	a0 = 13,93
N33-B	13,72	14,08	14,13	14,10	14,06	14,02	13,90	13,71	13,44	13,95	0,56	-1,22	0,88	2,19	oui
N33-H	13,37	13,73	13,88	14,00	14,07	14,12	14,12	14,06	13,78	13,94	0,56	-1,22	0,82	2,12	a0 = 13,94

**Fig. C.3 : Mesure de  $a_0$  par la méthode des 9 points (bainite)**

Annexe C : essais de ténacité et analyse fractographique

N° epr	a1	a2	a3	a4	a5	a6	a7	a8	a9	a0	critère 1 :	critère 2 :	critère 3 :	critère 4 :	validité
											$0,45 < a0/W < 0,70$	$\max(ai) - 1,1*a0 < 0$	$\min(ai) - 0,9*a0 > 0$	$\min(ai) - (1,3+ae) > 0$	
M50-B	13,86	14,14	14,17	14,13	14,15	13,99	13,85	13,68	13,30	13,96	0,56	-1,19	0,73	2,05	oui a0 = 13,96
M50-H	13,26	13,69	13,85	14,01	14,12	14,13	14,18	14,14	13,84	13,96	0,56	-1,17	0,70	2,01	
M51-B	13,73	14,00	14,09	14,13	14,07	13,99	13,97	13,76	13,34	13,94	0,56	-1,21	0,79	2,09	oui a0 = 13,94
M51-H	13,32	13,74	13,98	14,00	14,07	14,12	14,10	14,00	13,72	13,94	0,56	-1,22	0,77	2,07	
M52-B	14,15	14,32	14,32	14,23	14,11	13,96	13,73	13,49	13,06	13,97	0,56	-1,05	0,49	1,81	oui a0 = 13,96
M52-H	13,05	13,47	13,72	13,93	14,13	14,23	14,31	14,31	14,15	13,96	0,56	-1,05	0,48	1,80	
M53-B	13,77	14,01	14,12	14,13	14,11	13,98	13,87	13,67	13,36	13,93	0,56	-1,19	0,82	2,11	oui a0 = 13,93
M53-H	13,78	14,01	14,12	14,13	14,09	13,97	13,86	13,65	13,34	13,93	0,56	-1,19	0,81	2,09	
M54-B	13,89	14,12	14,16	14,20	14,17	14,00	13,81	13,59	13,19	13,95	0,56	-1,15	0,64	1,94	oui a0 = 13,94
M54-H	13,21	13,54	13,81	13,99	14,13	14,18	14,17	14,10	13,89	13,93	0,56	-1,14	0,67	1,96	
M55-B	13,89	14,17	14,24	14,24	14,13	14,05	13,84	13,58	13,17	13,97	0,56	-1,13	0,59	1,92	oui a0 = 13,96
M55-H	13,11	13,55	13,79	14,02	14,12	14,22	14,21	14,17	13,85	13,95	0,56	-1,12	0,56	1,86	
M56-B	13,69	13,99	14,09	14,10	14,06	14,01	13,91	13,68	13,36	13,92	0,56	-1,22	0,83	2,11	oui a0 = 13,91
M56-H	13,35	13,66	13,88	13,99	14,05	14,10	14,08	14,00	13,67	13,91	0,56	-1,20	0,83	2,10	
M57-B	13,84	14,14	14,18	14,14	14,10	13,96	13,75	13,53	13,14	13,91	0,56	-1,12	0,62	1,89	oui a0 = 13,91
M57-H	13,15	13,53	13,75	13,97	14,11	14,16	14,19	14,16	13,86	13,92	0,56	-1,12	0,62	1,90	
M58-B	13,76	14,04	14,10	14,05	14,04	13,99	13,85	13,65	13,27	13,91	0,56	-1,19	0,76	2,02	oui a0 = 13,90
M58-H	13,26	13,63	13,85	13,97	14,05	14,06	14,11	14,02	13,78	13,90	0,56	-1,18	0,75	2,01	
M59-B	14,04	14,33	14,28	14,18	14,07	13,95	13,75	13,49	13,07	13,95	0,56	-1,02	0,51	1,82	oui a0 = 13,94
M59-H	13,05	13,49	13,74	13,96	14,08	14,18	14,26	14,32	14,00	13,94	0,56	-1,02	0,50	1,80	

N° epr	a1	a2	a3	a4	a5	a6	a7	a8	a9	a0	critère 1 :	critère 2 :	critère 3 :	critère 4 :	validité
											$0,45 < a0/W < 0,70$	$\max(ai) - 1,1*a0 < 0$	$\min(ai) - 0,9*a0 > 0$	$\min(ai) - ae > 1,3$	
M60-B	13,84	14,10	14,21	14,20	14,19	14,04	13,89	13,66	13,25	13,98	0,56	-1,17	0,67	2,00	oui a0 = 13,97
M60-H	13,20	13,62	13,88	13,99	14,16	14,24	14,22	14,12	13,86	13,97	0,56	-1,13	0,63	1,95	
M61-B	13,83	14,13	14,17	14,14	14,04	13,95	13,81	13,58	13,20	13,92	0,56	-1,14	0,67	1,95	oui a0 = 13,91
M61-H	13,13	13,54	13,80	13,93	14,03	14,15	14,16	14,15	13,83	13,90	0,56	-1,14	0,61	1,88	
M62-B	13,72	14,00	14,03	14,06	14,03	13,95	13,81	13,64	13,23	13,87	0,55	-1,20	0,74	1,98	oui a0 = 13,88
M62-H	13,23	13,62	13,83	13,97	14,04	14,09	14,06	14,01	13,75	13,89	0,56	-1,18	0,73	1,98	
M63-B	13,93	14,17	14,22	14,16	14,06	13,89	13,68	13,38	12,91	13,87	0,55	-1,04	0,42	1,66	oui a0 = 13,87
M63-H	12,92	13,38	13,66	13,89	14,06	14,17	14,22	14,20	13,92	13,88	0,56	-1,04	0,44	1,67	

**Fig. C.4 : Mesure de  $a_0$  par la méthode des 9 points (martensite)**

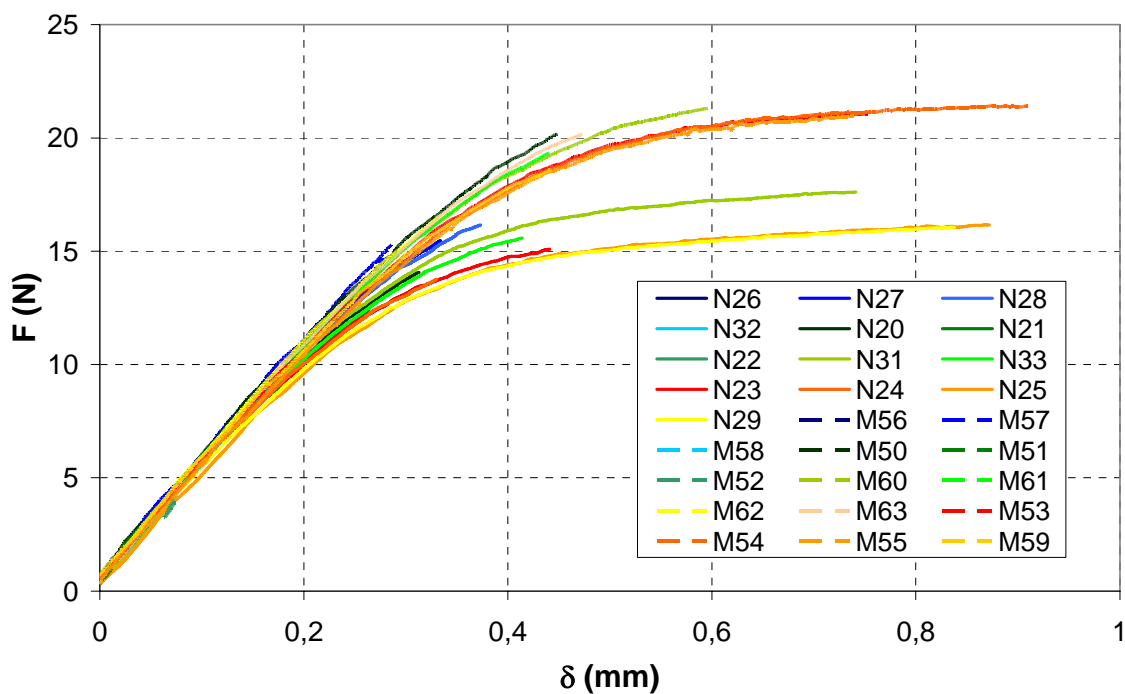
C.1.c Courbes force / ouverture  $F = f(\delta)$ 

Fig. C.5 : Récapitulatif des courbes  $F = f(\delta)$  pour l'ensemble des éprouvettes : (bainite en traits pleins et martensite en traits pointillés)

## a) Bainite

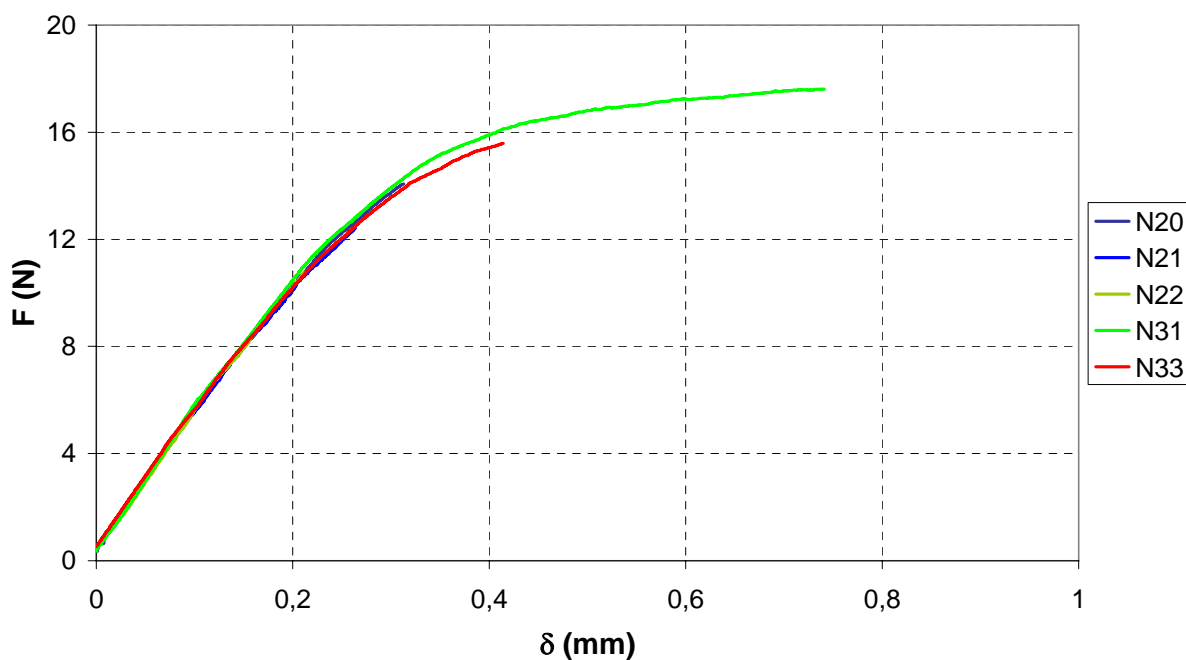


Fig. C.6 : Courbes  $F / \delta$  à  $T = -60^\circ\text{C}$  (bainite)

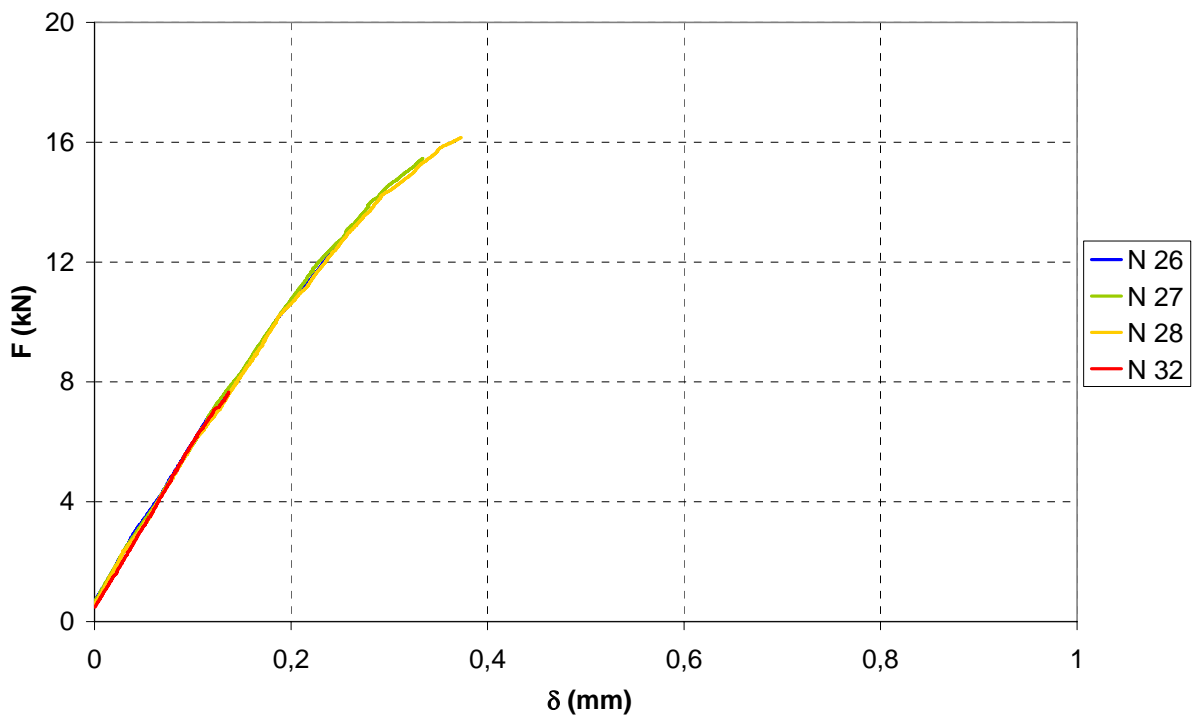


Fig. C.7 : Courbes  $F / \delta$  à  $T = -90^\circ\text{C}$  (bainite)

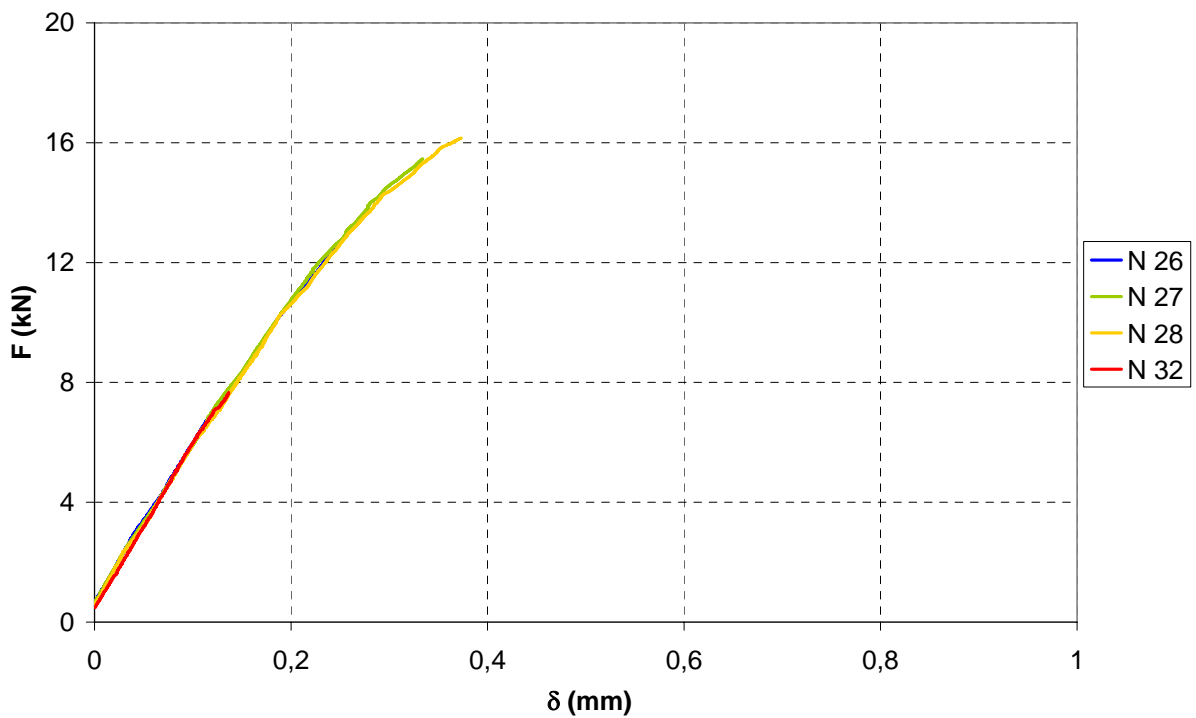


Fig. C.8 : Courbes  $F / \delta$  à  $T = -120^\circ\text{C}$  (bainite)

b) Martensite

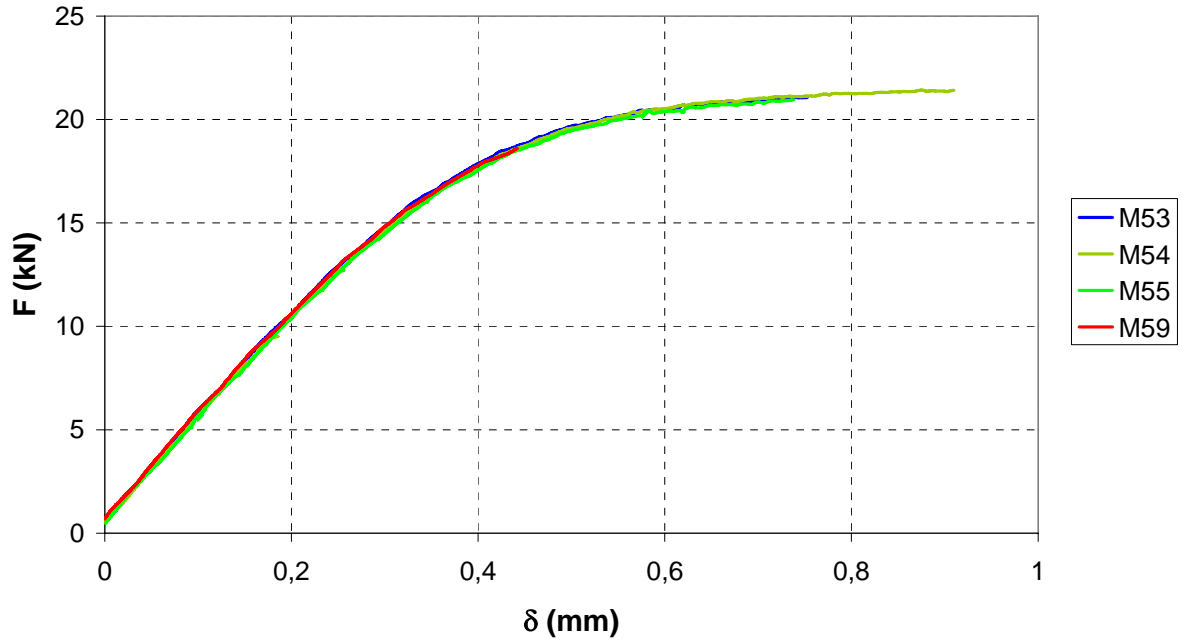


Fig. C.9 : Courbes  $F / \delta$  à  $T = -90^\circ\text{C}$  (martensite)

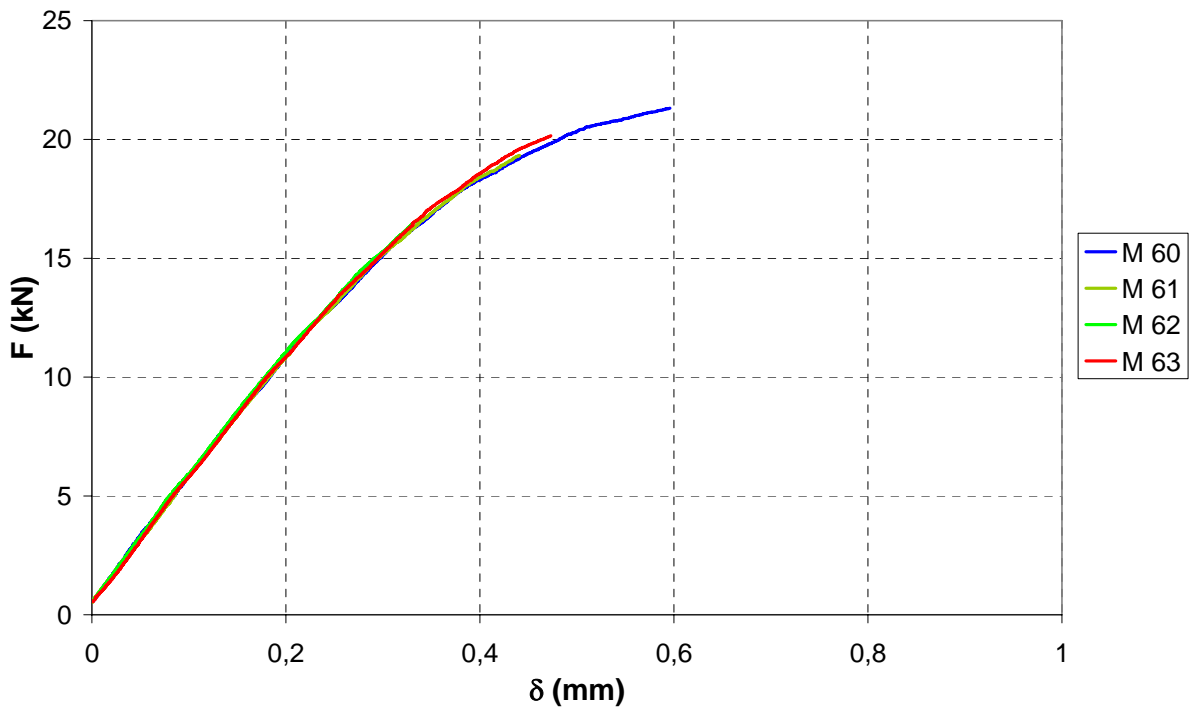


Fig. C.10 : Courbes  $F / \delta$  à  $T = -105^\circ\text{C}$  (martensite)

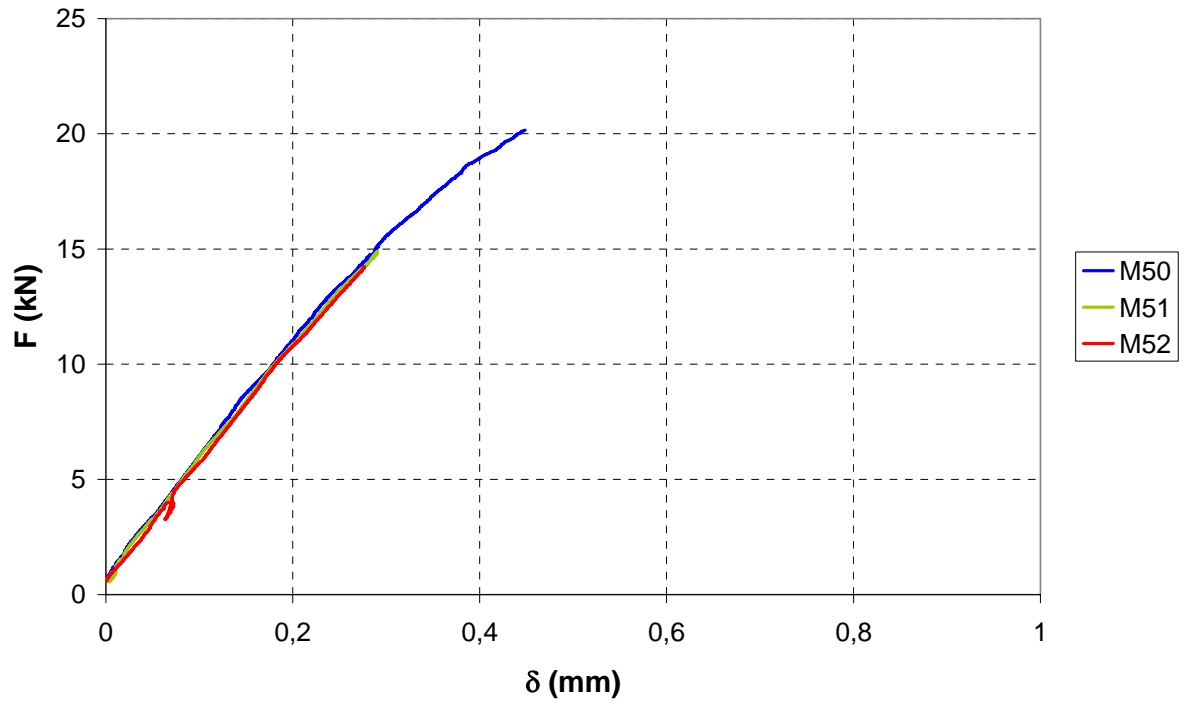


Fig. C.11 : Courbes  $F / \delta$  à  $T = -120^\circ\text{C}$  (martensite)

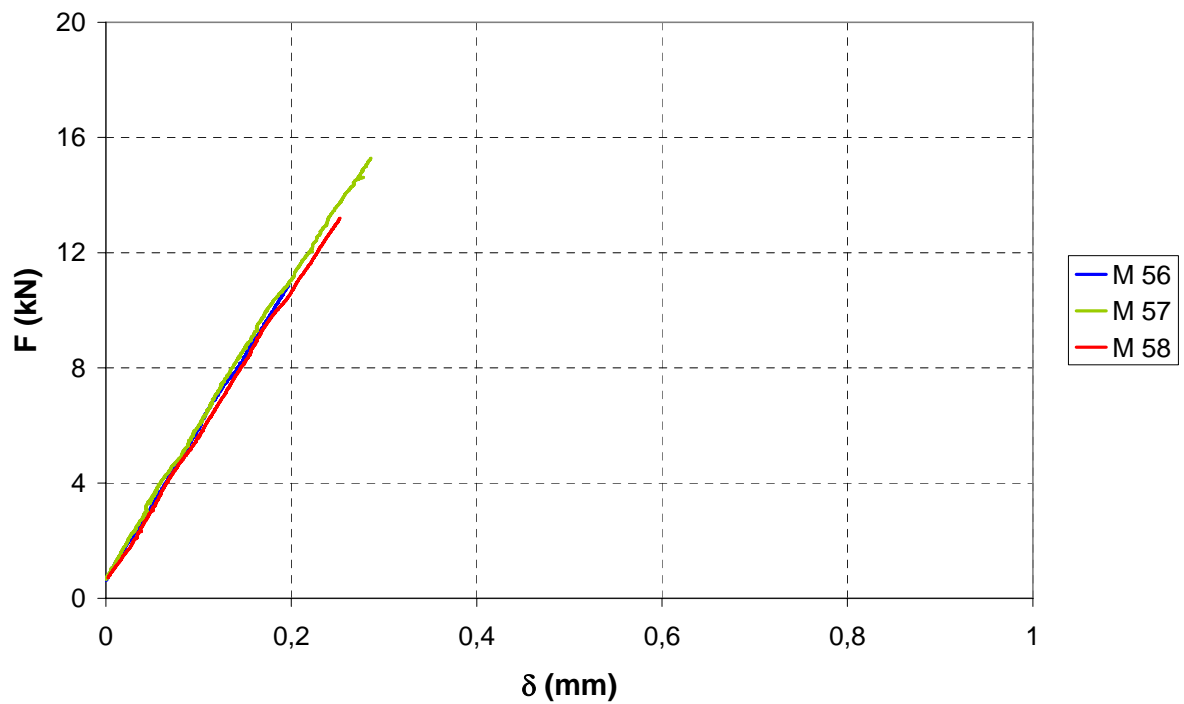


Fig. C.12 : Courbes  $F / \delta$  à  $T = -142^\circ\text{C}$  (martensite)

C.1.d Calcul de  $K_{JC}$ 

N° éprouvette	Température (°C)	B mesuré (mm)	$a_0$ (mm)	$K_{JC}$ (MPa)
262--N26	-120	12,50	13,92	76,7
262--N27	-120	12,50	13,90	100,3
262--N28	-120	12,50	13,93	109,5
262--N32	-120	12,51	13,93	44,5
262--N20	-90	12,50	13,91	92,5
262--N21	-90	12,50	13,99	77,4
262--N22	-90	12,50	13,93	63,5
262--N30	-90	12,50	13,95	117,3
262--N31	-90	12,50	13,98	185,1
262--N33	-90	12,50	13,94	118,2
262--N23	-60	12,50	13,95	120,1
262--N24	-60	12,50	13,93	94,3
262--N25	-60	12,50	13,90	191,3
262--N29	-60	12,50	13,95	185,8

Tableau C.1 : Tableau récapitulatif des valeurs de ténacité  $K_{JC}$  mesurées dans la bainite

N° éprouvette	Température (°C)	B mesuré	$a_0$ (mm)	$K_{JC}$ (MPa)
262--M53	-90	12,50	13,93	197,9
262--M54	-90	12,50	13,94	224,2
262--M55	-90	12,50	13,96	193,5
262--M59	-90	12,50	13,94	129,7
262--M60	-105	12,51	13,97	170,4
262--M61	-105	12,51	13,91	132,6
262--M62	-105	12,50	13,88	105,8
262--M63	-105	12,50	13,87	140,9
262--M50	-120	12,50	13,96	137,1
262--M51	-120	12,50	13,94	92,0
262--M52	-120	12,50	13,96	87,4
262--M56	-142	12,50	13,91	64,1
262--M57	-142	12,50	13,91	92,8
262--M58	-142	12,50	13,90	79,0

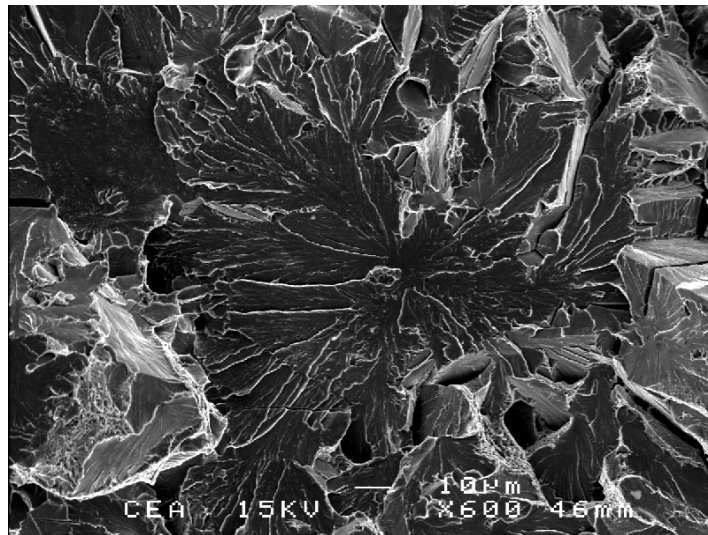
Tableau C.2 : Tableau récapitulatif des valeurs de ténacité  $K_{JC}$  mesurées dans la martensite

## C.2 Etude fractographique

Cette partie a pour principal objectif la caractérisation des sites d'amorçage de la rupture fragile, et des particules à l'origine de la propagation instable du clivage.

### C.2.a Bainite / T = -60°C

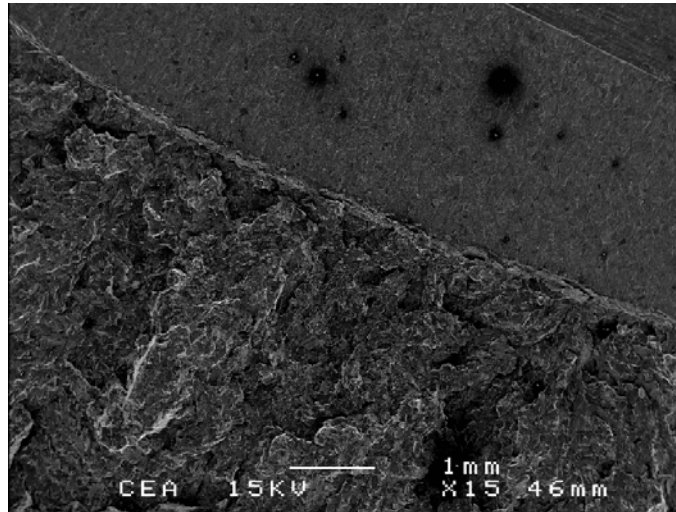
- **Eprouvette N24 ( $K_{JC} = 94 \text{ MPa m}^{1/2}$ ) :**
- On observe l'amorçage du clivage sur un amas de MnS de taille 10 $\mu\text{m}$  environ (figure C.1). Des traces de laitier (Cu, Al, Mg) ont également été retrouvées.



**Fig. C.13 :** Amorçage de la fissure sur un amas de MnS de taille  $\approx 10 \mu\text{m}$

- **Eprouvette N25 ( $K_{JC} = 191 \text{ MPa m}^{1/2}$ ) :**
- L'étude fractographique ne fait pas apparaître un site d'amorçage unique du clivage.
- Il existe un grand nombre de sites d'amorçage local du clivage, se caractérisant par la convergence des rivières de clivage vers de multiples points situés en avant du front de fissure (cf. figure C.14).
- On observe également un site d'amorçage local sur un amas de MnS qui ne semble cependant pas être la cause de la rupture de l'éprouvette.

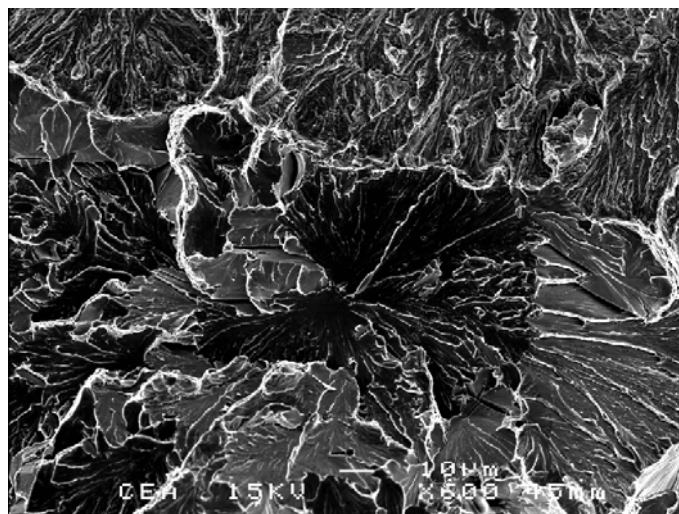




**Fig. C.14 :** Macrographie de l'éprouvette N25

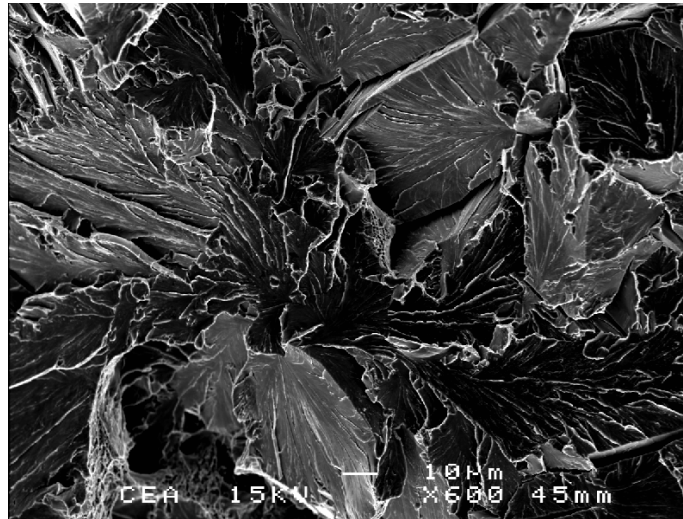
### C.2.b Bainite / T = -90°C

- **Eprouvette N22 ( $K_{JC} = 63 \text{ MPa m}^{1/2}$ ) :**
- Le site d'amorçage du clivage est identifié mais ne fait pas apparaître de particule de type MnS. Les rivières de clivage convergent vers une facette de clivage (figure C.15).
- Il n'est pas possible de mettre en évidence formellement l'amorçage du clivage sur un carbure.



**Fig. C.15 :** Site d'amorçage du clivage dans l'éprouvette N22

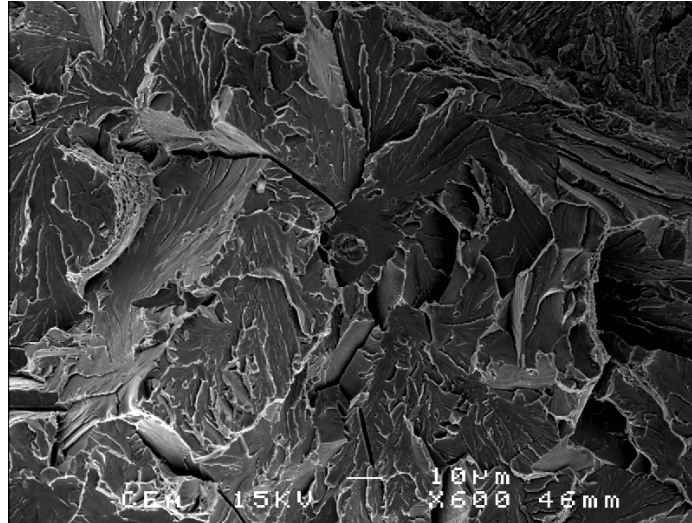
- **Eprouvette N30 ( $K_{JC} = 117 \text{ MPa m}^{1/2}$ ) :**
- Le site d'amorçage du clivage est identifié mais ne présente aucune particule de type MnS. Les rivières de clivage convergent vers une facette de clivage (figure C.16).
- Comme pour l'éprouvette N22, il n'est pas possible de mettre en évidence formellement l'amorçage du clivage à partir d'un carbure.



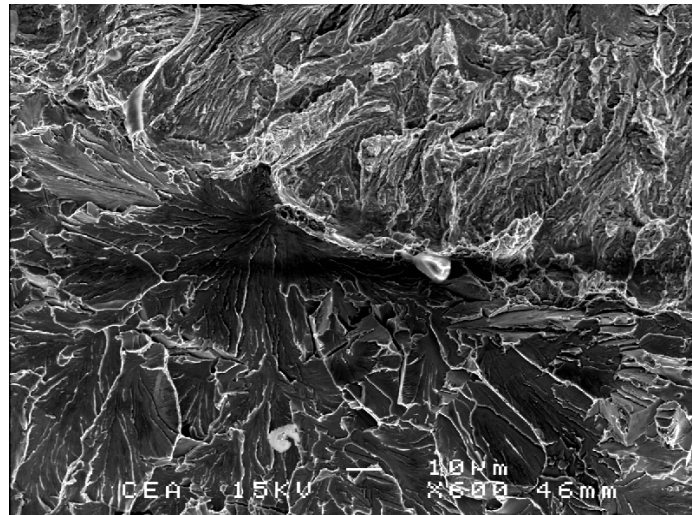
**Fig. C.16 :** Site d'amorçage du clivage dans l'éprouvette N30

### C.2.c Bainite / T = -120°C

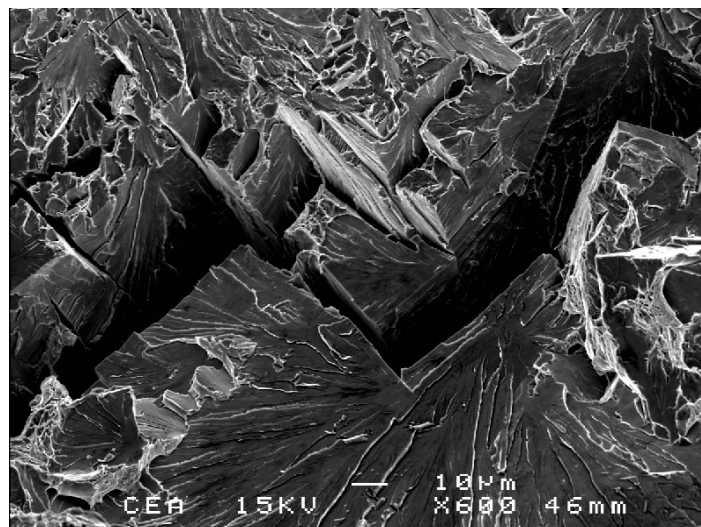
- **Eprouvette N27 ( $K_{JC} = 100 \text{ MPa m}^{1/2}$ ) :**
- On ne met pas en évidence un site unique d'amorçage du clivage.
- Localement, on observe des sites d'amorçage du clivage sans particules (cf. figure C.18).
- La figure C.17 montre une particule de MnS rompue de taille  $\approx 10 \mu\text{m}$ , à l'origine de l'amorçage local du clivage.
- De grandes fissures de clivages traversent l'éprouvette, mais sans converger vers un site unique (figure C.19).



**Fig. C.17 :** Site d'amorçage local du clivage sur un MnS dans l'éprouvette N27



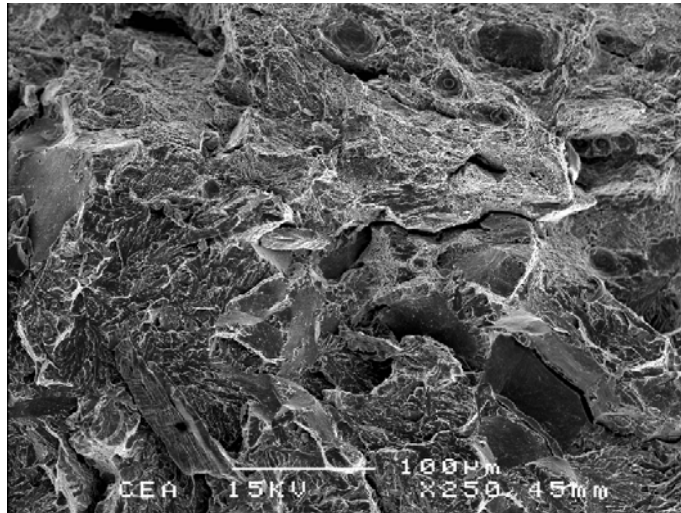
**Fig. C.18 :** Site d'amorçage local du clivage sans présence de MnS dans l'éprouvette N27



**Fig. C.19 :** fissures de clivage et facettes caractéristiques orientées à 90°

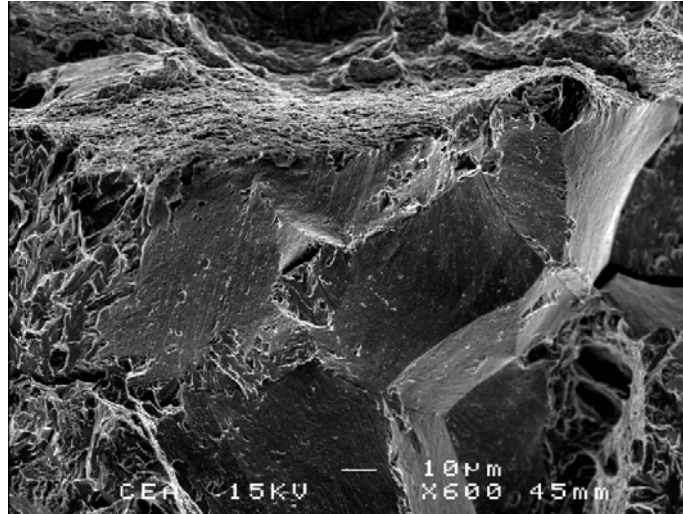
#### C.2.d Martensite / T = - 90°C

- **Eprouvette M54 ( $K_{JC} = 224 \text{ MPa m}^{1/2}$ ) :**
- On identifie un site principal d'amorçage du clivage, qui présente de nombreux faciès de décohéation intergranulaire (surface irrégulière) : il n'est pas possible de déterminer si ces faciès constituent la cause ou une conséquence de la rupture par clivage.
- Des zones de déchirure ductile sont observées en avant de la fissure de clivage (présence de cupules).
- On observe la présence de quelques MnS dans la zone de déchirure ductile, mais sur la surface rompue par clivage.



**Fig. C.20 :** Site d'amorçage du clivage dans l'éprouvette M54

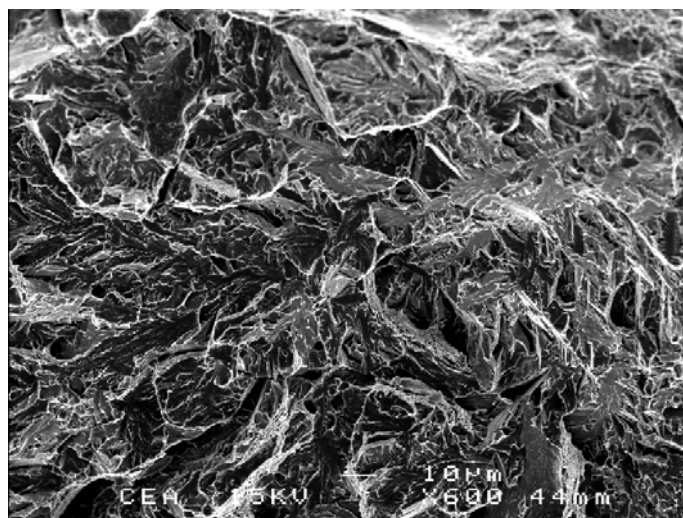
- **Eprouvette M59 ( $K_{JC} = 130 \text{ MPa m}^{1/2}$ ) :**
- Il n'est pas possible d'identifier précisément un site principal d'amorçage du clivage.
- La figure C.21 montre la présence de plusieurs faciès de décohéation intergranulaire, notamment à proximités des sites locaux d'amorçage.
- On observe quelques cupules de rupture ductile sur le front de préfissuration



**Fig. C.21** : Site local d'amorçage du clivage dans l'éprouvette M59 : présence de faciès de décohéation intergranulaire

#### C.2.e Martensite / T = -120°C

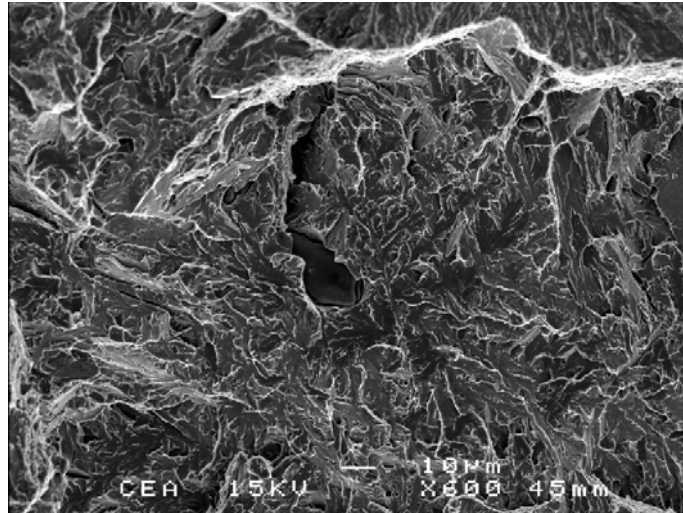
- **Eprouvette M50 ( $K_{JC} = 137 \text{ MPa m}^{1/2}$ ) :**
- On identifie un site principal d'amorçage du clivage et plusieurs sites secondaires. Le site principal ne présente pas de particules de seconde phase apparentes.
- Quelques faciès de décohéation intergranulaires sont observés
- Le faciès de rupture par clivage s'accompagne de quelques ligaments de déchirure ductile.



**Fig. C.22** : Site d'amorçage local du clivage dans l'éprouvette M50

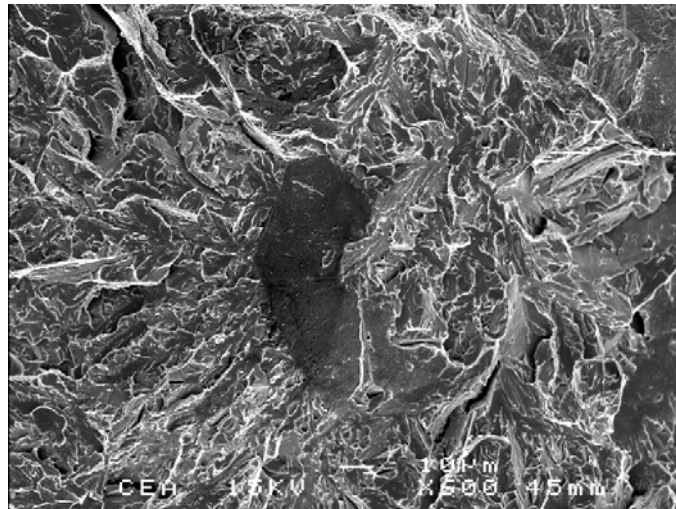
**C.2.f Martensite / T = -142°C**

- **Eprouvette M56 ( $K_{JC} = 64,1 \text{ MPa m}^{1/2}$ ) :**
- Le site d'amorçage du clivage est clairement identifié : convergence de l'ensemble des rivières de clivage vers un amas de MnS de taille  $\approx 20 \mu\text{m}$ .
- présence de faciès de clivage et décohésion intergranulaire.
- On n'observe que très peu de déchirure ductile à proximité du front de préfissuration.



**Fig. C.23 :** Amorçage du clivage sur une particule de MnS dans l'éprouvette M56

- **Eprouvette M57 ( $K_{JC} = 92,8 \text{ MPa m}^{1/2}$ ) :**



**Fig. C.24 :** Amorçage du clivage dans l'éprouvette M57

- On met en évidence un site d'amorçage principal du clivage (figure C.24) ainsi que plusieurs sites secondaires.
- Des faciès de décohéation intergranulaire et quelques ligaments de déchirure ductile sont observés.

## Annexe D

### **Caractérisation de la microstructure au MET et mesures de densité de dislocations**



## TABLE DES MATIERES

### D. Caractérisation de la microstructure au MET et mesure de densité de dislocations

<b>D.1 Observations MET.....</b>	<b>289</b>
<i>D.1.a Bainite : état non déformé (<math>\varepsilon = 0\%</math>) .....</i>	<i>289</i>
<i>A.1.b Bainite : état déformé à <math>\varepsilon = 12\%</math> et <math>T = 25\text{ °C}</math> .....</i>	<i>293</i>
<i>A.1.c Bainite : état déformé à <math>\varepsilon = 9\%</math> et <math>T = -196\text{ °C}</math> .....</i>	<i>296</i>
<i>A.1.d Martensite : état non déformé (<math>\varepsilon = 0\%</math>) .....</i>	<i>298</i>
<b>D.2 Mesures de densité moyenne de dislocations.....</b>	<b>301</b>
<b>Références bibliographiques .....</b>	<b>303</b>

Différents états métallurgiques ont été observés, tant sur le matériau initial qu'après déformation en traction simple. Les échantillons déformés ont été réalisés à partir d'éprouvettes de traction simple de diamètre  $\phi = 3,5$  mm ayant servi à la caractérisation mécanique du comportement (*Rapport d'avancement n°1, chapitre II.2, mai 2005*). Les lames minces sont prélevées dans la zone non strictionnée des éprouvettes, et le niveau moyen de déformation est donné par la déformation à striction mesurée lors de l'essai de traction instrumenté.

- **Bainite :**

- 2 lames minces à l'état non déformé ( $\varepsilon = 0$  %)
- 1 lame mince à l'état déformé à  $\varepsilon = 12$  % et  $T = 293$  K - *éprouvette 262-R01*.
- 1 lame mince à l'état déformé à  $\varepsilon = 9$  % et  $T = 77$  K - *éprouvette 262-R16*.

- **Martensite :**

- 2 lames minces à l'état non déformé ( $\varepsilon = 0$  %).

## D.1 Observations MET

### D.1.a Bainite : état non déformé ( $\varepsilon = 0$ %)

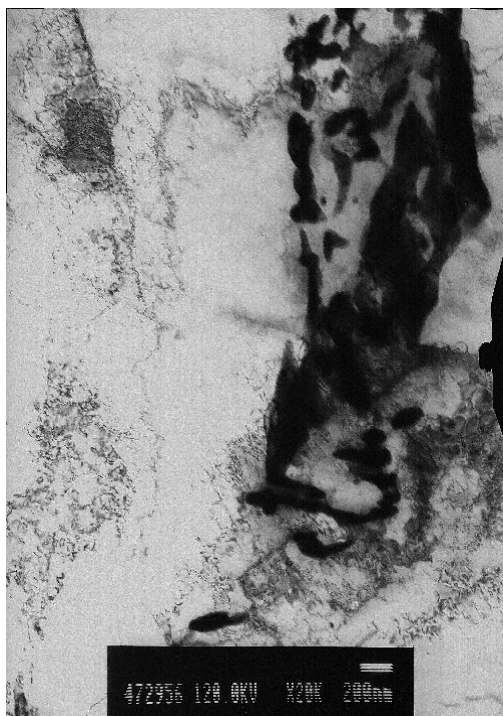


Fig. D.1

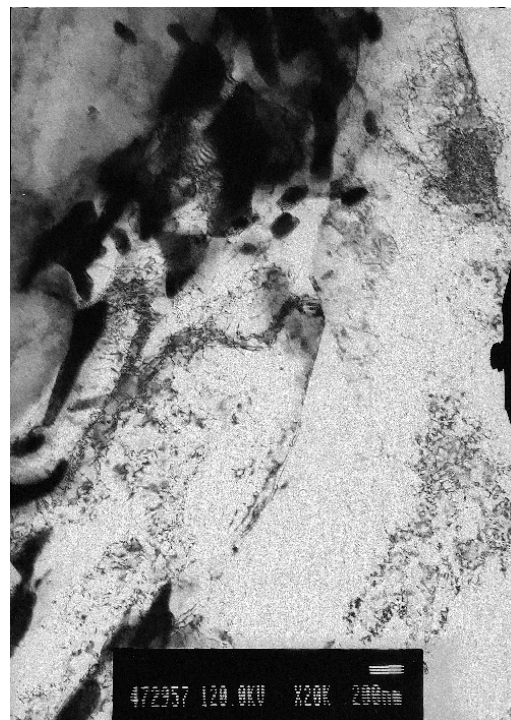
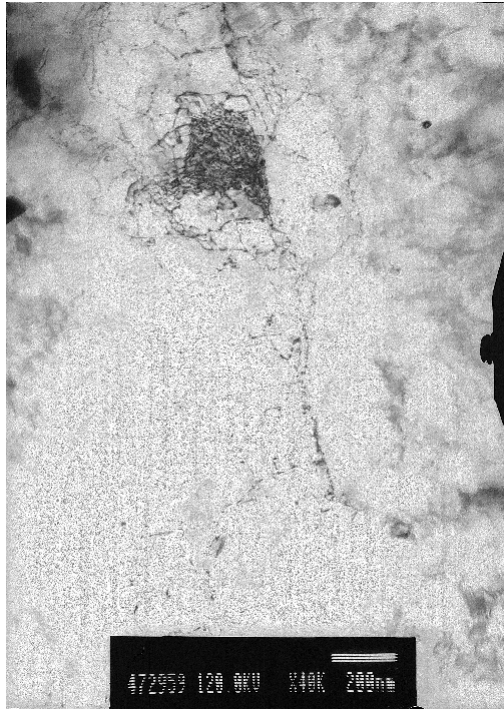
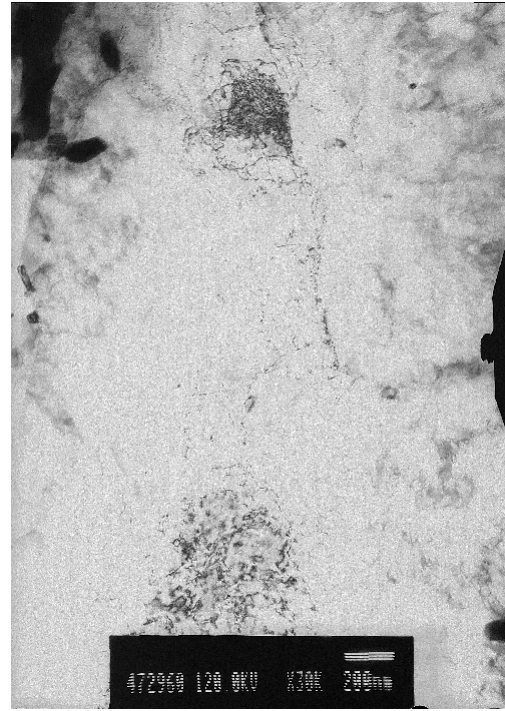


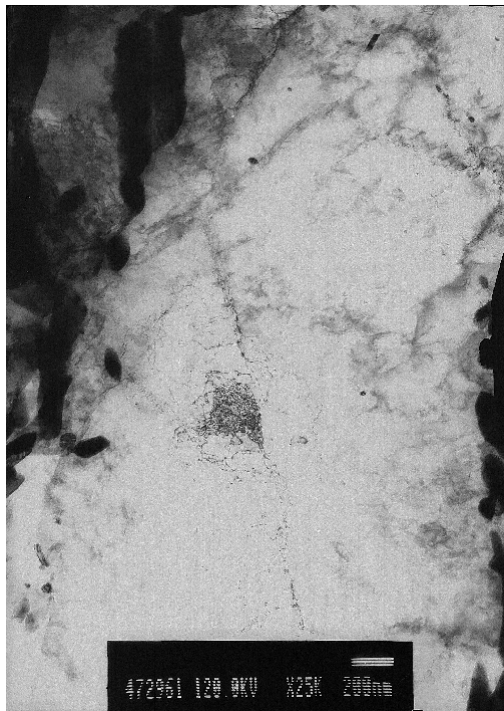
Fig. D.2



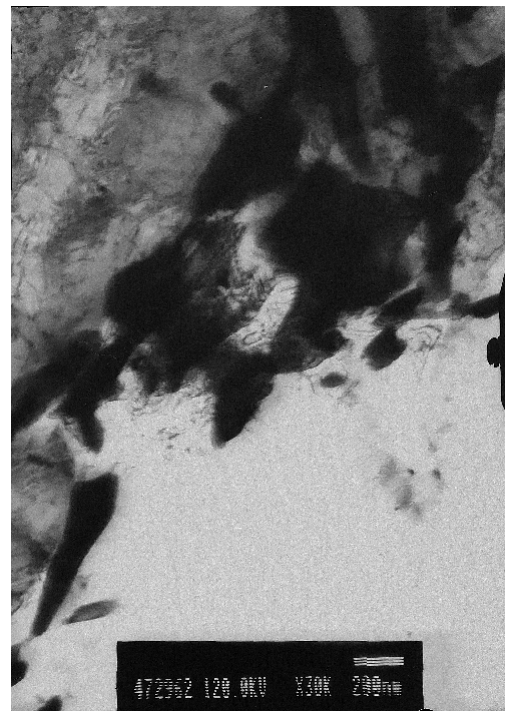
**Fig. D.3**



**Fig. D.4**



**Fig. D.5**



**Fig. D.6**

- **Fig. D.5** : carbures regroupés en 'amas' aux joints de lattes: l'épaisseur apparente élevée des lattes (plusieurs centaines de nm) serait due à l'inclinaison des joints de lattes par rapport à la surface de la lame. Ils apparaissent comme étant épais du fait de l'inclinaison.

- **Fig. D.6** : observation de dislocations ancrées sur un précipité de carbure de titane (forme cubique)

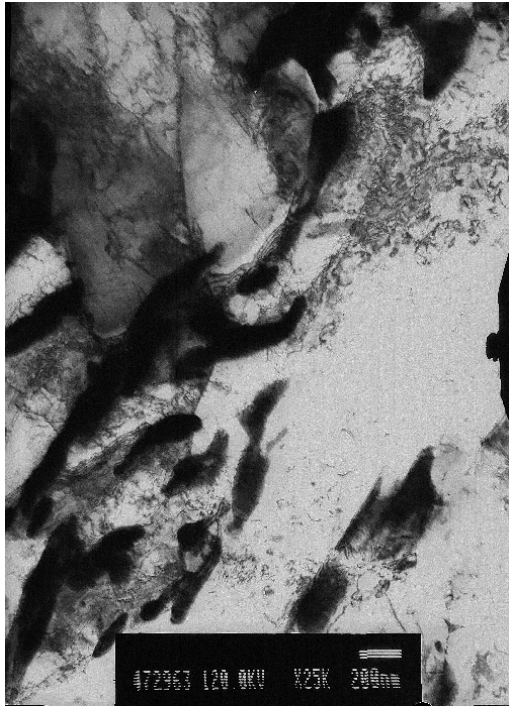


Fig. D.7



Fig. D.8



Fig. D.9

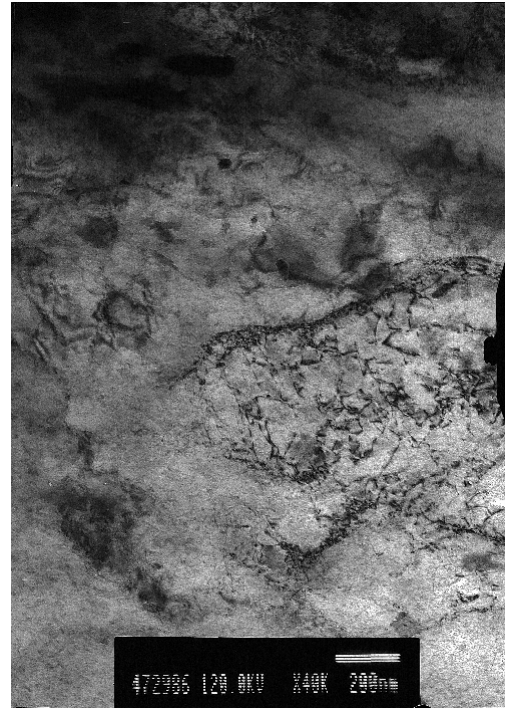


Fig. D.10

- **Fig. D.7** : à l'intérieur des lattes, les dislocations sont condensées en amas et forment des joints de polygonisation: cette réorganisation peut s'expliquer par le traitement de revenu (20 heures à 610°C).
- **Fig. D.8** : Les carbures sont de forme allongée et mesurent de 200 à 300 nm de long.
- **Fig. D.9** : Forte courbure des dislocations vraisemblablement liée aux  $\sigma$  résiduelles.



**Fig. D.11**



**Fig. D.12**



**Fig. D.13**

- **Fig. D.9, D.11** : Les bandes rectilignes et proches de l'horizontale semblent correspondre à des murs de dislocations.

- **Fig. D.12** : Observation de moirés de désorientation aux joints de lattes dus à la superposition de 2 cristaux C.C. désorientés. Les moirés sont caractéristiques des faibles désorientations entre 2 lattes (à ne pas confondre avec les lignes de dislocations lors des mesures de  $\rho$ )

A.1.b Bainite : état déformé à  $\varepsilon = 12 \%$  et  $T = 25 \text{ }^\circ\text{C}$

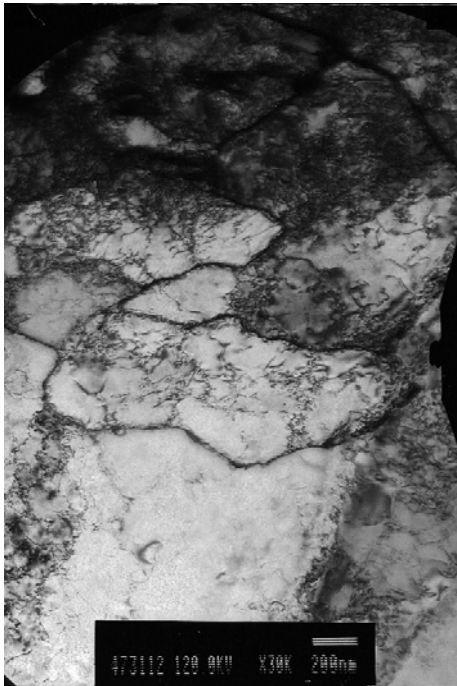


Fig. D.14



Fig. D.15

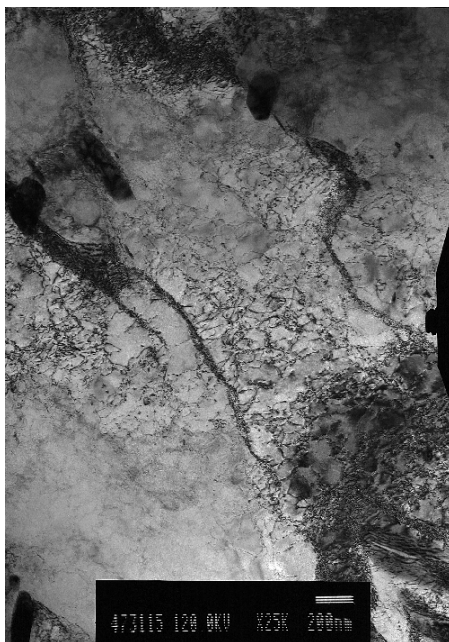


Fig. D.16

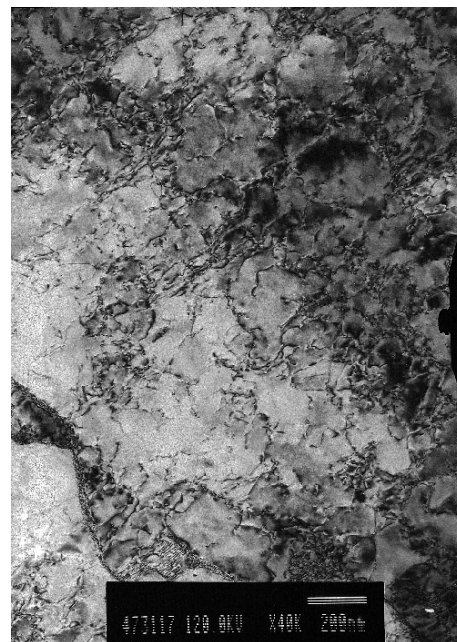
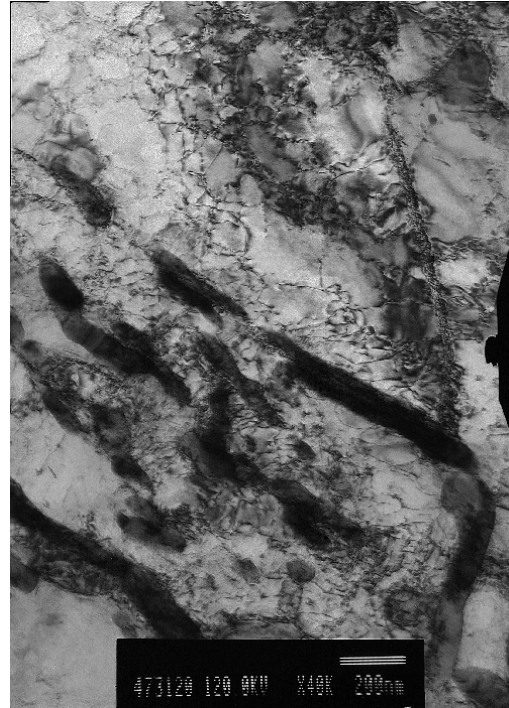


Fig. D.17

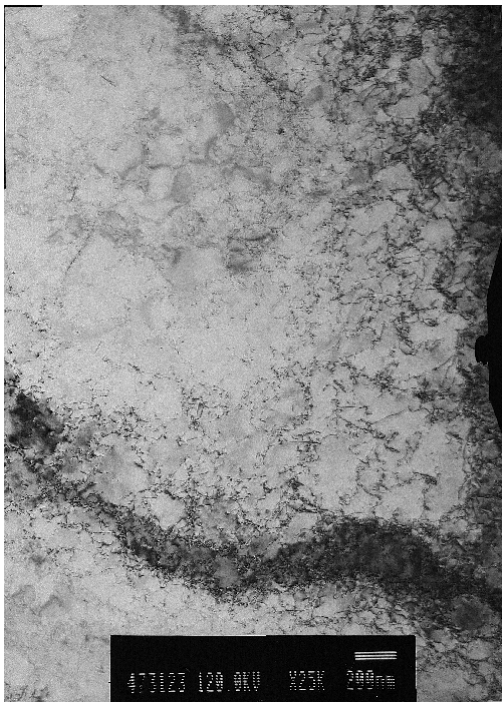
- **Fig. D.14** : Début de formation de cellules de dislocations de taille  $1 \mu\text{m}$  environ.
- **Fig. D.15** : observation d'un contour d'inclinaison au bout d'une latte de forme pointue. Observation de carbures de  $200$  à  $300 \text{ nm}$  d'épaisseur et  $1 \mu\text{m}$  de longueur.
- **Fig. D.16** : La fraction volumique de carbures est plus faible aux extrémités des lattes.



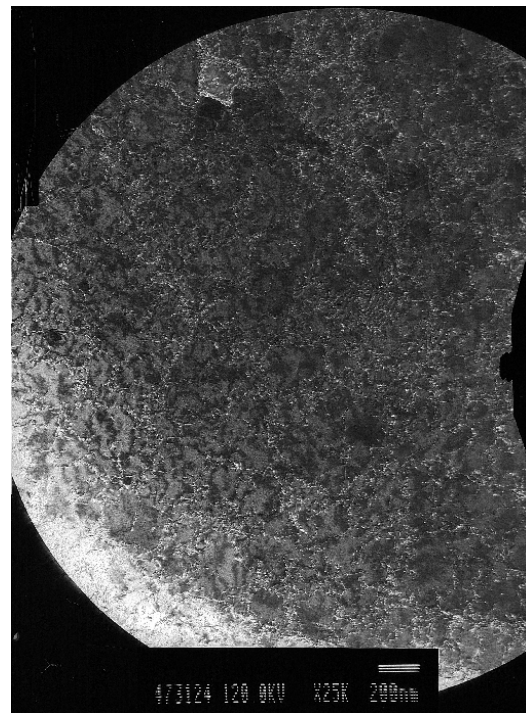
**Fig. D.18**



**Fig. D.19**



**Fig. D.20**



**Fig. D.21**

- **Fig. D.19** : observation d'un joint de latte fortement incliné au centre de l'image, et d'un joint de flexion à droite.

- **Fig. D.20, D.21** : le plan de latte coïncide avec celui de la lame ce qui explique l'absence d'interfaces visibles

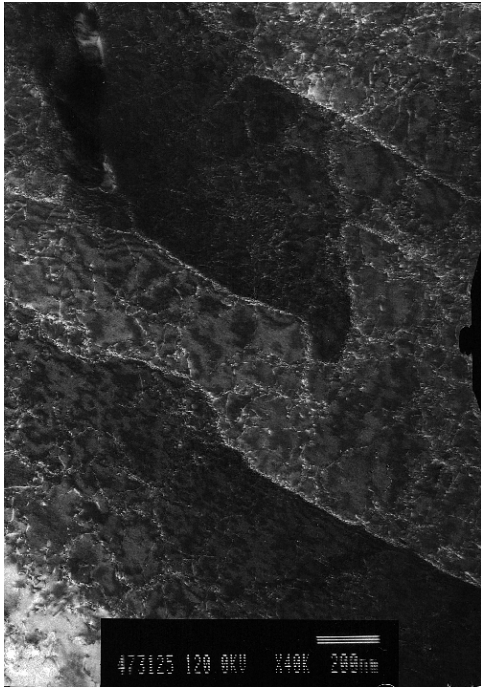


Fig. D.22

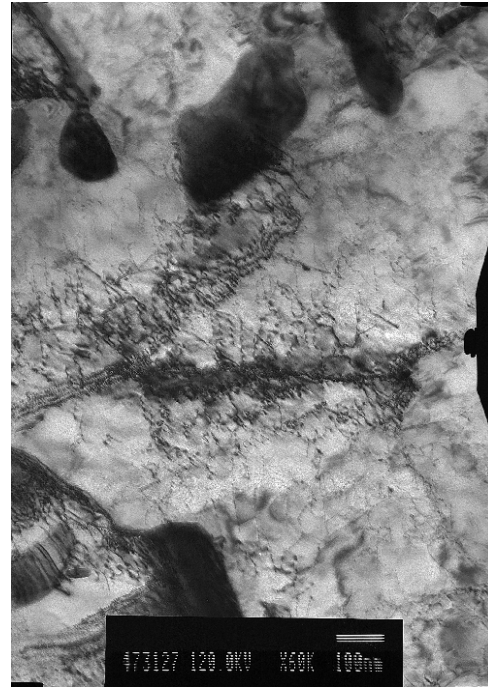


Fig. D.23

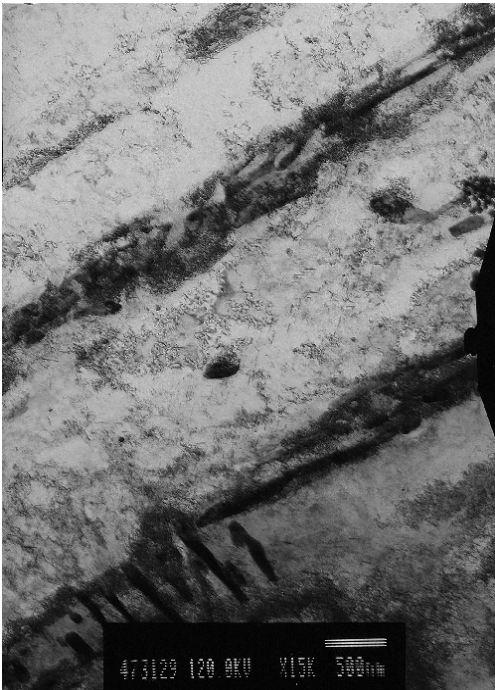


Fig. D.24



Fig. D.25

- **Fig. D.22** : Observation de cellules et parois de dislocations, probablement initiées sur des joints de flexion.
- **Fig. D.23** : Présence de dislocations d'interface (sessiles ?) aux joints de lattes. Création d'un joint de flexion par émission de dislocations à partir de l'interface.
- **Fig. D.24** : Observation de 4 lattes successives, dont les interfaces sont continûment décorées par des carbures. La latte en bas du cliché semble beaucoup plus déformée.
- **Fig. D.24, D.25** : Les lattes qui apparaît avec une coloration sombre semblent nettement plus déformée que les autres lattes.



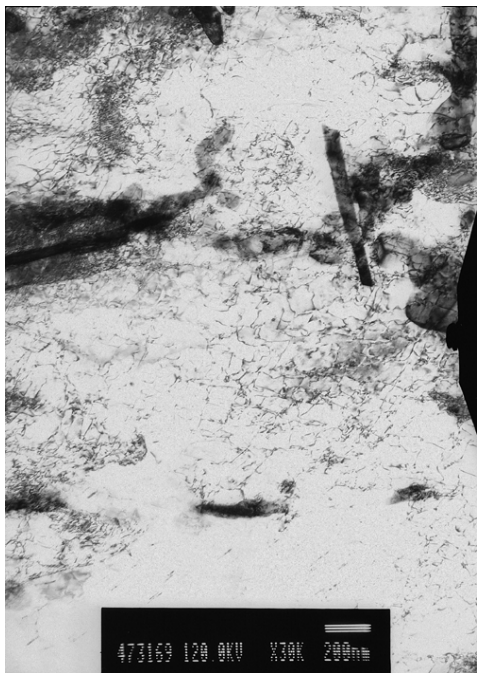
**A.1.c Bainite : état déformé à  $\varepsilon = 9\%$  et  $T = -196\text{ °C}$**



**Fig. D.26**



**Fig. D.27**



**Fig. D.28**



**Fig. D.29**

**Observations générales (fig. D.26 à D.33) :**

- Les dislocations ont tendance à former des segments rectilignes qui ne sont pas observés à  $25\text{ °C}$ . Ces observations sont en accord avec celles de Robertson *et al.* [ROB05] mais doivent être validées en orientant la lame par rapport au réseau C.C.
- Sur les segments rectilignes, des crans peuvent être observés.

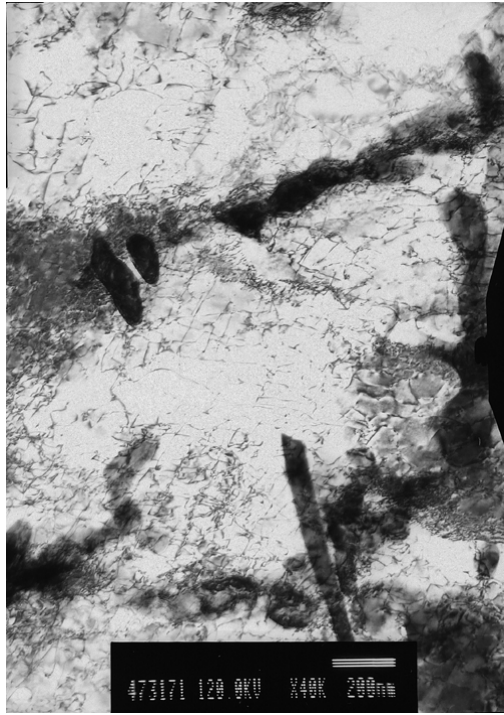


Fig. D.30



Fig. D.31



Fig. D.32



Fig. D.33

**Observations générales (fig. D.26 à D.33) :**

- On observe localement la présence de débris. Le mécanisme de '*cross kink*' peut être invoqué pour interpréter ces observations. Ce mécanisme d'avancée des dislocations engendre des glissements déviés multiples le long d'un même segment vis. Les segments coins ainsi créés jouent le rôle d'ancrages et la dislocation vis avance en laissant des débris derrière elle ('*cross kink unzipping*'). Ce mécanisme est caractéristique du glissement plastique C.C. sous forte contrainte [MAR04].

**A.1.d Martensite : état non déformé ( $\varepsilon = 0 \%$ )**



**Fig. D.34**



**Fig. D.35**



**Fig. D.36**



**Fig. D.37**

**Observations générales (fig. D.34 à D.45) :**

- Observation d'un réseau de dislocations très dense aux joints de lattes : suivant l'angle de tilt, on observe soit des moirés traduisant la superposition de 2 réseaux faiblement désorientés, soit des empilements de dislocations en joints de polyгонisation formés lors du traitement de recuit. Aux interfaces, la densité de dislocations peut atteindre  $10^{15}$  à  $10^{16}$  m<sup>-2</sup>.



Fig. D.38

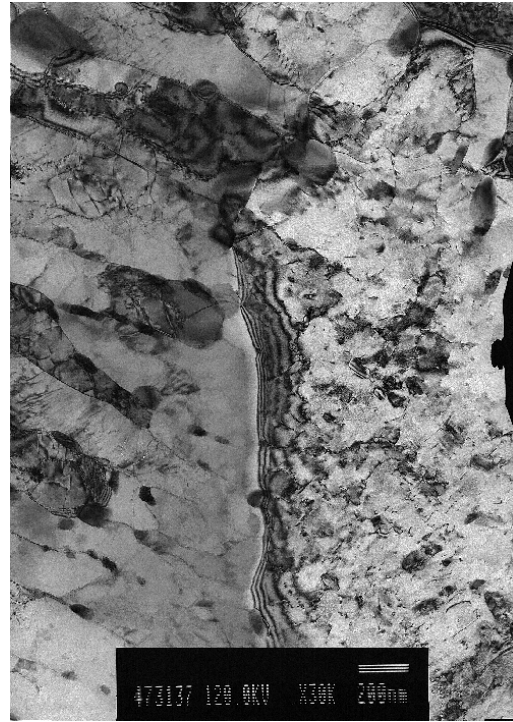


Fig. D.39



Fig. D.40

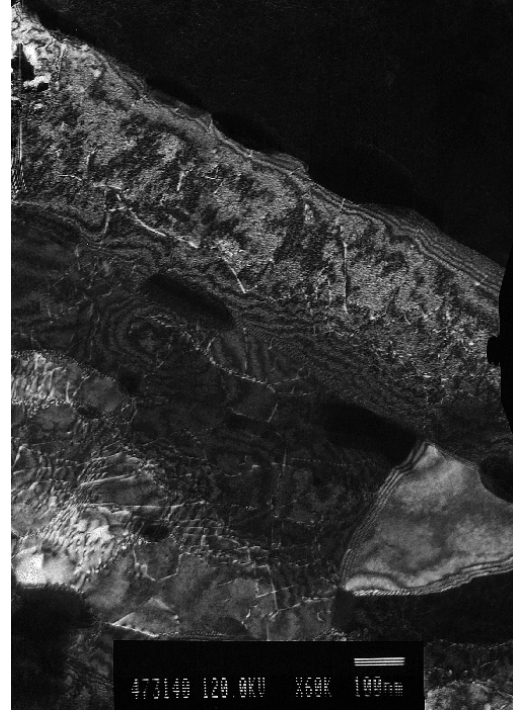


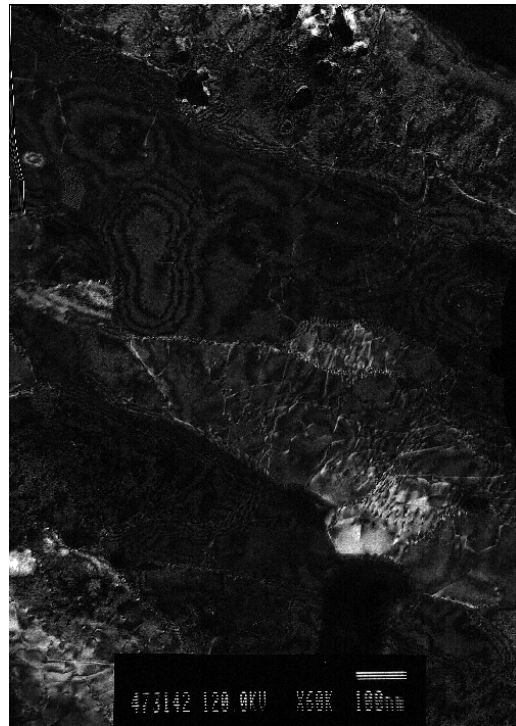
Fig. D.41

**Fig. D.39, D.40 :**

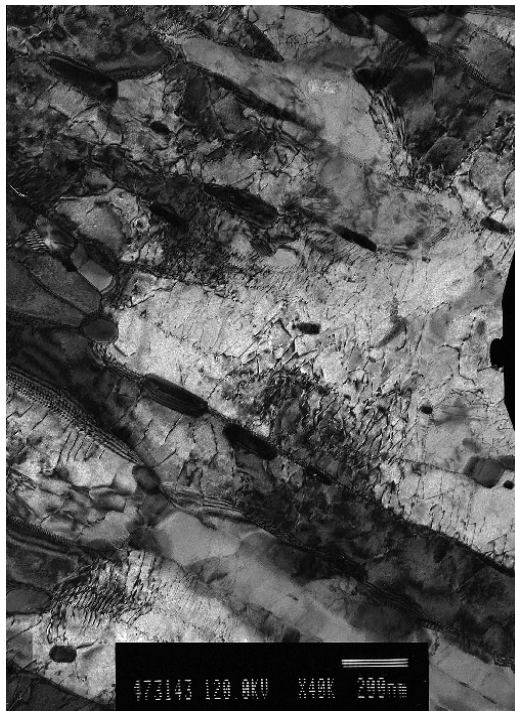
- Le joint au milieu de l'image sépare 2 paquets de lattes voire 2 ex-grains  $\gamma$  (présence de moirés). Les lattes de l'entité de droite sont orientées de telle façon qu'on ne voit pas les interfaces et les carbures. A noter que les dislocations ont une configuration typique des réseaux C.C., ce qui avec le cliché de diffraction (Fig. n° 41), exclut qu'il s'agisse d'austénite résiduelle. La vitesse de refroidissement élevée ainsi que la teneur en C de 0,25% excluent également la formation de ferrite + perlite.



**Fig. D.42**



**Fig. D.43**



**Fig. D.44**



**Fig. D.45**

**Fig. D.42** : observation de franges d'égal épaisseur en haut à droite de l'image. Ces franges ont été utilisées afin de mesurer l'épaisseur de la lame.

## D.2 Mesures de densité moyenne de dislocations

Des mesures ont été réalisées sur les 2 matériaux bainitique et martensitique, avant et après déformation. La méthode utilisée est celle décrite dans le chapitre II.2.a. du rapport. Pour chaque cliché MET, 5 à 6 segments sont tracés aléatoirement, ce qui permet de faire 5 à 6 mesures de  $\rho$ . Pour chaque cliché MET, la densité est ensuite calculée par une moyenne pondérée par la longueur de chaque segment ( $\rho_{pondéré}$ ).

$$\rho_0 = \frac{2 N_{intersections}}{L e_{lame}} \quad (D.1)$$

$$\rho_{pondéré} = \sum_{i=1}^N \frac{L(i) \rho_0(i)}{L_{tot}} \quad (D.2)$$

Pour un état de déformation donné, la densité moyenne finale intègre les valeurs calculées sur 5 à 7 clichés MET différents. Pour chaque cliché MET utilisé pour les mesures de  $\rho$ , on calcule les valeurs suivantes :

- $L_{apparent}$  : longueur apparente du segment (i) sur l'image MET (imprimée au format A4)
- $L$  : longueur du segment (i) convertie en nm
- $N_{intersections}$  : nombre d'intersections entre le segment et les lignes de dislocations
- **Pondération** : longueur du segment (i) rapportée à la longueur totale de tous les segments.
- $\rho_0$  : valeur de  $\rho$  mesurée sur le segment (i)
- $\rho_{pondéré}$  : moyenne par cliché pondérée par la longueur de chaque segment (i).
- $\rho_{moyen}$  : moyenne arithmétique sur tous les segments.

A titre d'exemple, le tableau D.1 donne le nombre d'intersections par segment, les densités moyennes par segment et la densité totale (en  $m^{-2}$ ) pour tous les segments pour le cliché MET de la figure D.1 (bainite,  $\varepsilon=0\%$ ,  $T=25^\circ C$ ).

N° cliché 472956 (Fig. n°1)				
echelle nm - cm	200	1,15		
L apparent (cm)	L (nm)	Nintersections	pondération (L)	rho0
21,3	3,70E+03	36	2,35E-01	2,59E+14
22,7	3,95E+03	22	2,50E-01	1,49E+14
17,8	3,10E+03	24	1,96E-01	2,07E+14
9,8	1,70E+03	18	1,08E-01	2,82E+14
9,7	1,69E+03	11	1,07E-01	1,74E+14
9,4	1,63E+03	12	1,04E-01	1,96E+14
<b>L total (nm)</b>			<b>rho pondéré</b>	<b>rho moyen</b>
1,58E+04			2,08E+14	2,11E+14

**Tableau D.1** : Mesure de la densité de dislocation moyenne par cliché MET

Les mesures de densités de dislocations ont été réalisées dans les clichés MET suivants :

- **Bainite /  $T = 25^\circ\text{C}$  /  $\varepsilon = 0\%$**  : figures D.1, D.2, D.4, D.10, D.11, D.12, D.13
- **Bainite /  $T = 25^\circ\text{C}$  /  $\varepsilon = 12\%$**  : figures D.14, D.15, D.16, D.17, D.18, D.19, D.20
- **Bainite /  $T = -196^\circ\text{C}$  /  $\varepsilon = 9\%$**  : figures D.26, D.28, D.29, D.30, D.31, D.32
- **Martensite /  $T = 25^\circ\text{C}$  /  $\varepsilon = 0\%$**  : figures D.36, D.37, D.38, D.40, D.41, D.42, D.45

Le tableau D.2 présente une synthèse des valeurs moyennes obtenues pour les 4 conditions expérimentales énoncées ci-dessus.

	$T = 25^\circ\text{C} / \varepsilon = 0 \%$	$T = 25^\circ\text{C} / \varepsilon = 12 \%$	$T = -196^\circ\text{C} / \varepsilon = 9 \%$
Bainite	$2,8 \cdot 10^{14}$	$3,3 \cdot 10^{14}$	$3,5 \cdot 10^{14}$
Martensite	$3,5 \cdot 10^{14}$		

**Tableau D.2** : Récapitulatif des mesures de densités de dislocations dans la bainite et la martensite

Les observations et les mesures nous permettent de conclure que les densités de dislocations, mesurées à l'intérieur des lattes, sont très proches entre bainite et martensite. Les mesures ne nous ont pas permis de mettre en évidence des hétérogénéités significative, ce qui nous conduit à faire, dans le modèle, l'hypothèse d'une densité de dislocation initiale homogène et de l'ordre de  $10^{14} \text{ m}^{-2}$ . Toutefois, les dislocations forment des structures très organisées et très denses aux joints de lattes, où la densité peut atteindre  $10^{15}$  voire  $10^{16} \text{ m}^{-2}$ . Or les interfaces sont beaucoup plus nombreuses dans la martensite que dans la bainite. Dans le cadre d'une étude ultérieure, il serait nécessaire de considérer le phénomène d'émission des dislocations à partir des interfaces.

Nous ne constatons pas d'augmentation significative de la densité moyenne de dislocations avec le niveau de déformation. Pour interpréter ce résultat, on peut formuler l'hypothèse suivante : la densité initiale étant très élevée, les mécanismes d'annihilation compensent assez rapidement les sources de dislocations et la densité sature très rapidement. D'autre part, on peut également imaginer que le matériau contient suffisamment de dislocations pour accommoder la déformation, ce qui expliquerait la stagnation de la densité moyenne. D'autre part, il serait intéressant d'étudier la densité moyenne de dislocations prédite par le modèle micromécanique du **chapitre V** et de comparer son évolution avec les mesures expérimentales.

Les observations réalisées sur le matériau bainitique déformé à  $-196^\circ\text{C}$  montrent une légère tendance à la formation de segments vis rectilignes, mais pas à un comportement typique de celui rencontré à 77 K dans le Fer- $\alpha$ , et qui se caractérise par une disparition des segments mixtes. Cette particularité peut très bien résulter du glissement plastique sous forte contrainte, elle peut également s'expliquer par à un effet de taille de microstructure sur la courbure des dislocations. L'étude de la martensite déformée à 77 K serait susceptible de donner de nouveaux indices.

Les observations montrent que les carbures mesurent environ 200 à 300 nm en moyenne (jusqu'à 1  $\mu\text{m}$  localement) et sont quasi-exclusivement concentrés aux joints de lattes, y compris dans la martensite. Dans le cadre de la compréhension des mécanismes d'amorçage de la rupture, il serait intéressant d'orienter les carbures par rapport au réseau cristallin de la matrice C.C, notamment afin d'étudier les relations d'orientations entre les carbures et les plans de clivage  $\{100\}$ .

## Références bibliographiques

[MAR04] MARIAN (J.), CAI (W.), BULATOV (V.) – *Dynamic Transitions in Dislocation Motion : from smooth to rough to twinning*. Nature Materials, vol. n°3, p. 158, 2004.

[ROB05] ROBERTSON (C.F.), OBERTLIK (K.), MARINI (B.) – *Dislocation structures in 16MND5 pressure vessel steel strained in uniaxial tension*. Journal of Nuclear Materials, vol. n°342, Issues 1-3, pp. 35-41, 2005.

[ROB07] ROBERTSON (C.F.), OBERTLIK (K.), MARINI (B.) – *Dislocation structures in 16MND5 pressure vessel steel strained in uniaxial tension at different temperatures from -196°C up to 25°C*. Journal of Nuclear Materials, vol. n°356, Issues 1-2, pp. 58-69, 2007.





Annexe E

**Simulation des hétérogénéités mécaniques locales**

## TABLE DES MATIERES

### E. Simulation des hétérogénéités mécaniques locales

<b>E.1</b>	<b>Résultats de simulation numérique : cartographies.....</b>	<b>307</b>
<i>E.1.a</i>	<i>Cartographies de contraintes principales maximales.....</i>	<i>307</i>
<i>E.1.b</i>	<i>Cartographies de déformation équivalente.....</i>	<i>309</i>
<i>E.1.c</i>	<i>Cartographies de contraintes de clivage <math>\sigma_{\{100\}}</math>.....</i>	<i>312</i>
<b>E.2</b>	<b>Résultats de simulation numérique : histogrammes de distribution de <math>\sigma_1</math> et <math>\sigma_{\{100\}}</math> .....</b>	<b>314</b>
<i>E.2.a</i>	<i>Distribution des contraintes principales maximales <math>\sigma_1</math>.....</i>	<i>315</i>
<i>E.2.b</i>	<i>Distribution des contraintes de clivage <math>\sigma_{\{100\}}</math>.....</i>	<i>321</i>
<i>E.2.c</i>	<i>Comparaison <math>\sigma_1 / \sigma_{\{100\}}</math>.....</i>	<i>326</i>
<i>E.2.d</i>	<i>Comparaison agrégat n°1 / agrégat n°2.....</i>	<i>330</i>
<b>E.3</b>	<b>Etude qualitative de l'évolution des hétérogénéités de contraintes principales maximales <math>\sigma_1</math>.....</b>	<b>333</b>
<i>E.3.a</i>	<i>Evolution de <math>\delta(\sigma_1)</math> dans l'agrégat n°1.....</i>	<i>333</i>
<i>E.3.b</i>	<i>Evolution de <math>\delta(\sigma_1)</math> dans l'agrégat n°2.....</i>	<i>335</i>
<b>E.4</b>	<b>Etude quantitative des distributions de contraintes principales <math>\sigma_1</math> dans la microstructure .....</b>	<b>337</b>
<i>E.4.a</i>	<i>Choix des fonctions de distributions étudiées .....</i>	<i>337</i>
<i>E.4.b</i>	<i>Identification d'une fonction de type Gumbel de première espèce à partir des hétérogénéités de <math>\sigma_1</math> dans l'agrégat polycristallin .....</i>	<i>338</i>
<i>E.4.c</i>	<i>Paramétrisation de la constante A associée à la distribution de Gumbel de première espèce en fonction de <math>\langle \sigma_1 \rangle</math>.....</i>	<i>345</i>
<i>E.4.d</i>	<i>Paramétrisation de la constante B associée à la distribution de Gumbel de première espèce en fonction de <math>\langle \sigma_1 \rangle</math>, <math>\langle \varepsilon_{eq} \rangle</math> et <math>\langle \sigma_{mises} \rangle</math>.....</i>	<i>348</i>
<i>E.4.e</i>	<i>Tentative d'identification d'une fonction de distribution de type Gumbel de deuxième espèce sur les hétérogénéités de <math>\sigma_1</math>.....</i>	<i>360</i>
<i>E.4.f</i>	<i>Identification d'une fonction de type Weibull .....</i>	<i>368</i>

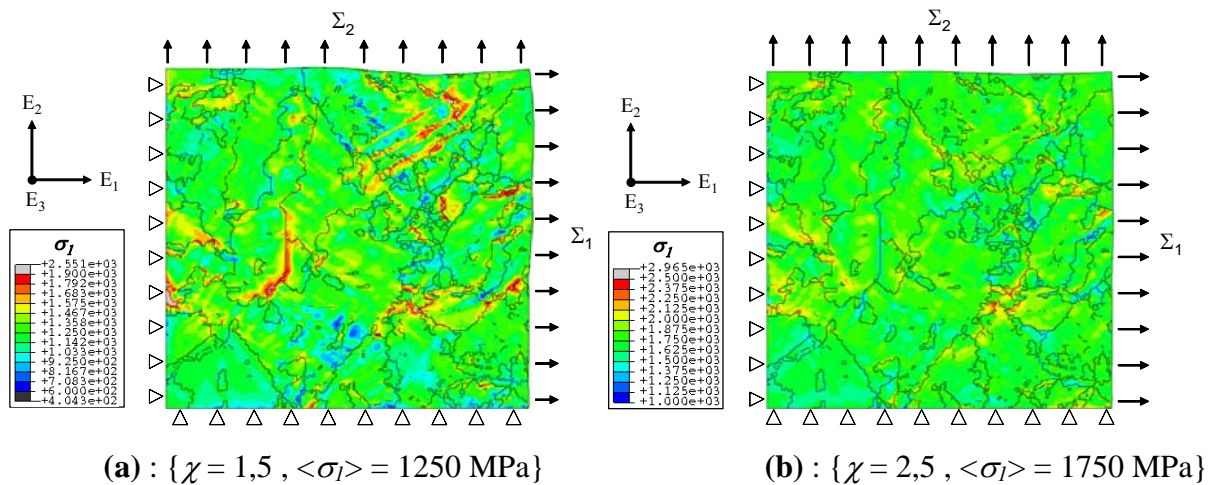
## E.1 Résultats de simulation numérique : cartographies

Pour tous les résultats présentés dans le chapitre E.1 de l'annexe, les joints de désorientation (avec un angle de désorientation supérieur à  $10^\circ$ ) sont superposés aux cartographies de contrainte principale maximale  $\sigma_I$ , de déformation équivalente  $\varepsilon_{eq}$  et de contraintes de clivage  $\sigma_{\{100\}}$ .

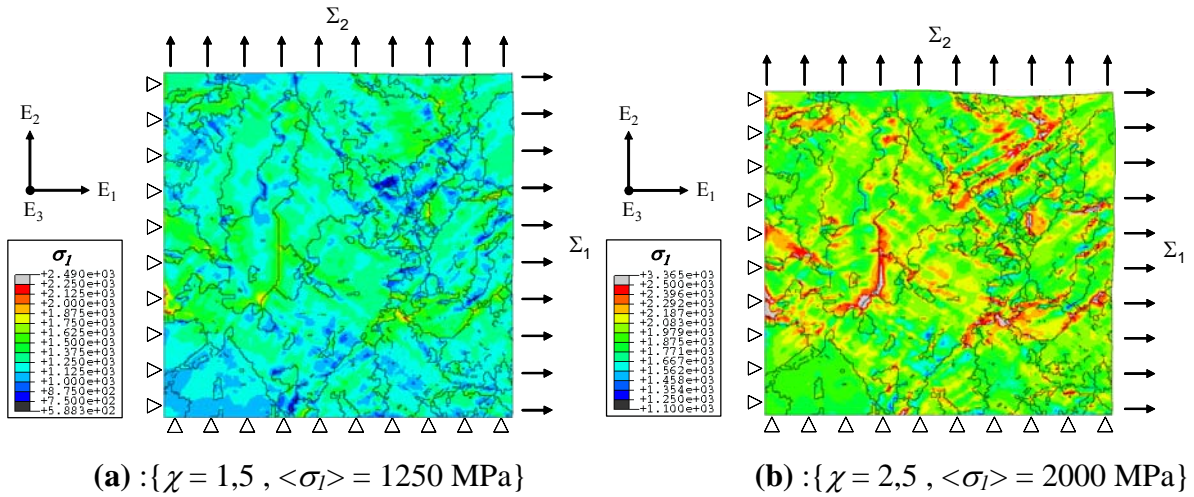
### E.1.a Cartographies de contraintes principales maximales

#### a) Agrégat n°1

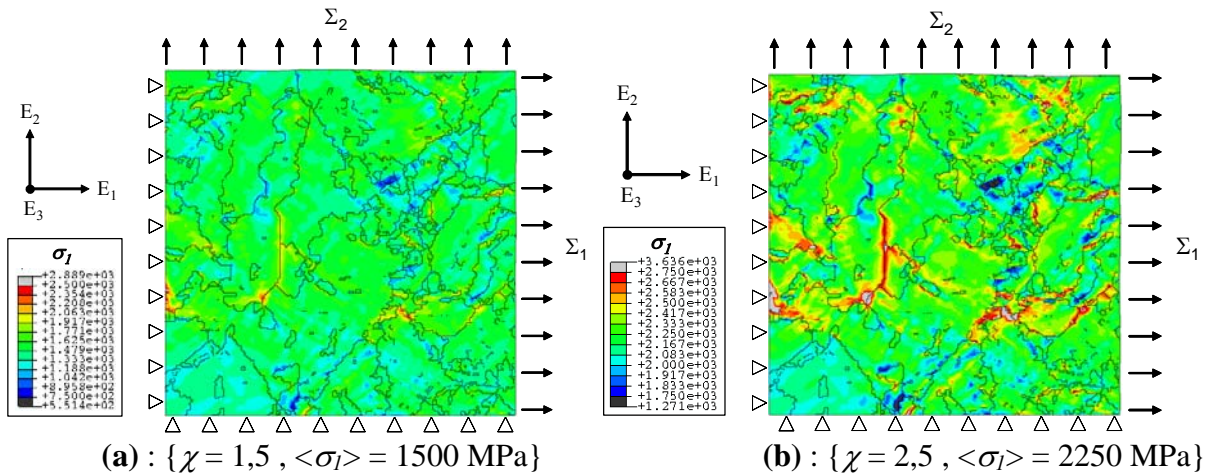
Les contraintes principales  $\sigma_I$  sont essentiellement localisées à certains joints entre paquets de lattes. La température  $T$  et de la triaxialité  $\chi$  influent sur l'intensité respective des zones de localisation de  $\sigma_I$ , mais pas sur leur positionnement dans l'agrégat. Il faut nuancer cette remarque par le fait que les simulations sont réalisées à contraintes principales moyennes imposées et que les différentes cartographies peuvent correspondre à des niveaux de déformation très différents (de l'ordre de  $\langle \varepsilon_{eq} \rangle = 5\%$  à  $T = -196^\circ\text{C}$  et  $\chi = 2,5$  jusqu'à  $\langle \varepsilon_{eq} \rangle = 20\%$  pour  $T = -90^\circ\text{C}$  et  $\chi = 1,5$ )



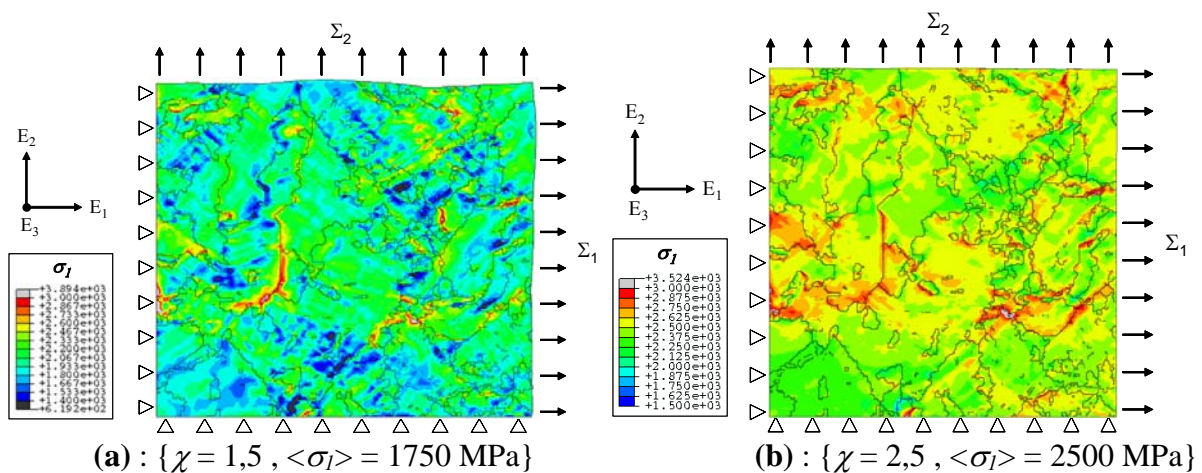
**Fig. E.1** : Cartographie  $\sigma_I$  à  $T = -60^\circ\text{C}$  :  $\chi = 1,5$  (a) et  $\chi = 2,5$  (b)



**Fig. E.2** : Cartographie  $\sigma_I$  à  $T = -90^\circ\text{C}$  :  $\chi = 1,5$  (a) et  $\chi = 2,5$  (b)

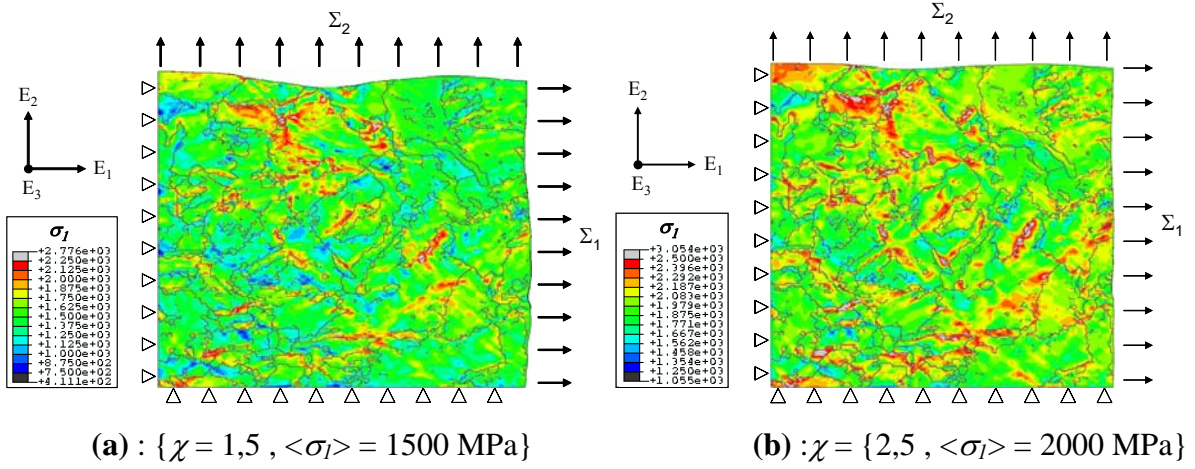


**Fig. E.3** : Cartographie  $\sigma_I$  à  $T = -150^\circ\text{C}$  :  $\chi = 1,5$  (a) et  $\chi = 2,5$  (b)

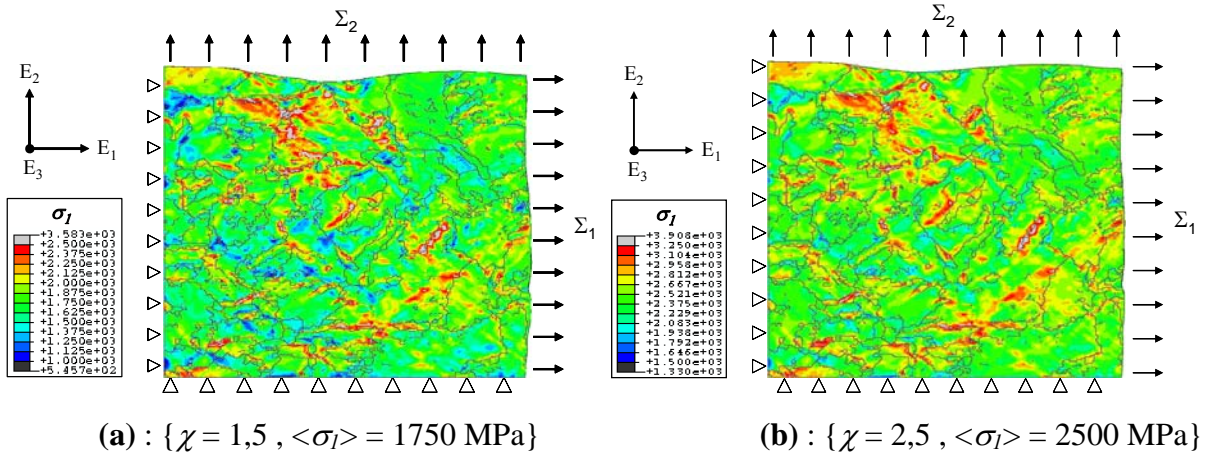


**Fig. E.4** : Cartographie  $\sigma_I$  à  $T = -196^\circ\text{C}$  :  $\chi = 1,5$  (a) et  $\chi = 2,5$  (b)

**b) Agrégat n°2**



**Fig. E.5** : Cartographie  $\sigma_I$  à  $T = -90^\circ\text{C}$  :  $\chi = 1,5$  (a) et  $\chi = 2,5$  (b)



**Fig. E.6** : Cartographie  $\sigma_I$  à  $T = -150^\circ\text{C}$  :  $\chi = 1,5$  (a) et  $\chi = 2,5$  (b)

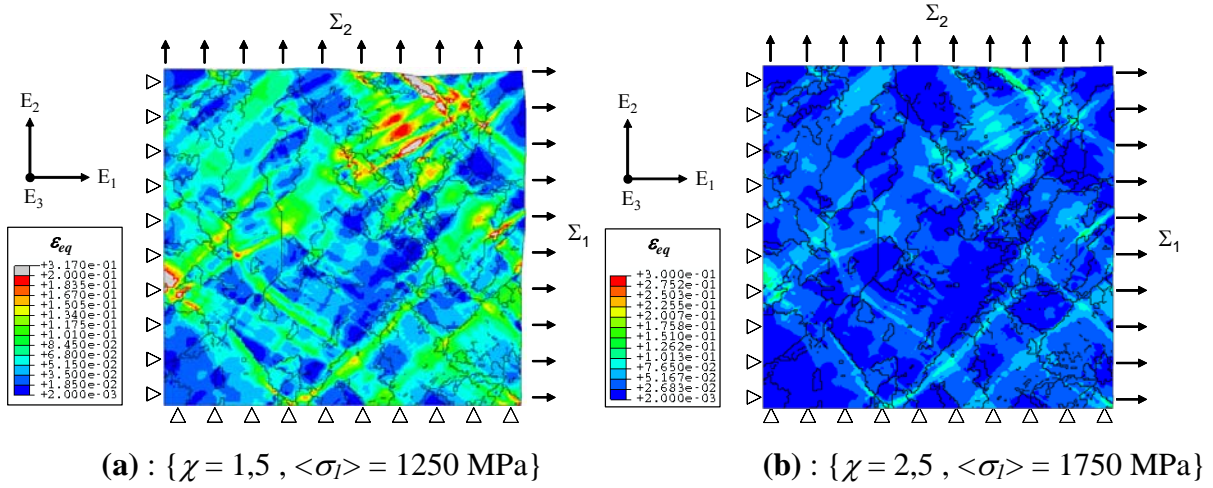
**E.1.b Cartographies de déformation équivalente**

La déformation totale équivalente est une variable interne et elle est calculée en chaque point d'intégration du maillage par la relation suivante :

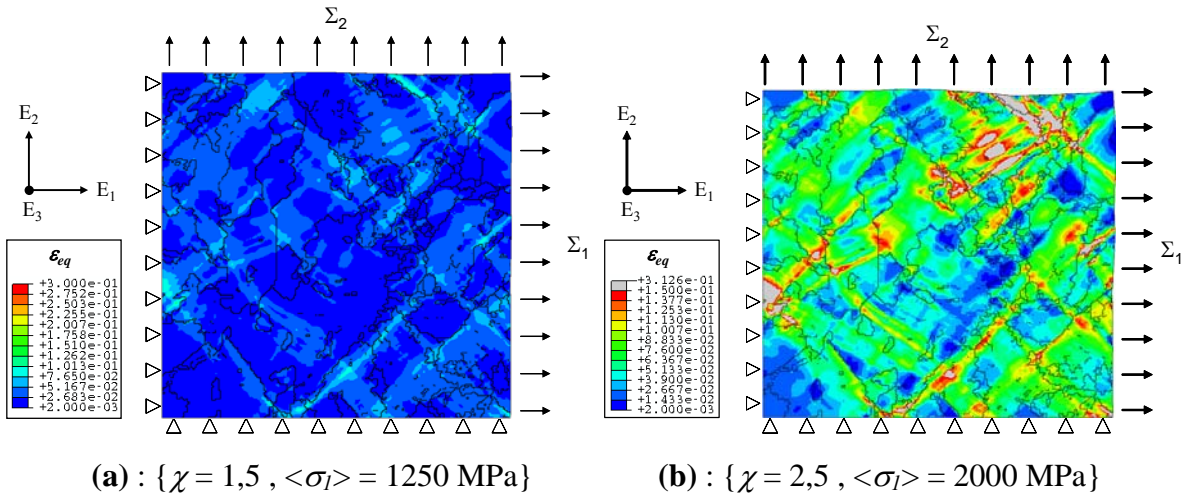
$$\varepsilon_{eq} = \sqrt{\frac{2}{3} \underline{\underline{\varepsilon}} : \underline{\underline{\varepsilon}}} \quad (\text{E.1})$$

où  $\underline{\underline{\varepsilon}}$  désigne le tenseur des déformations locales.

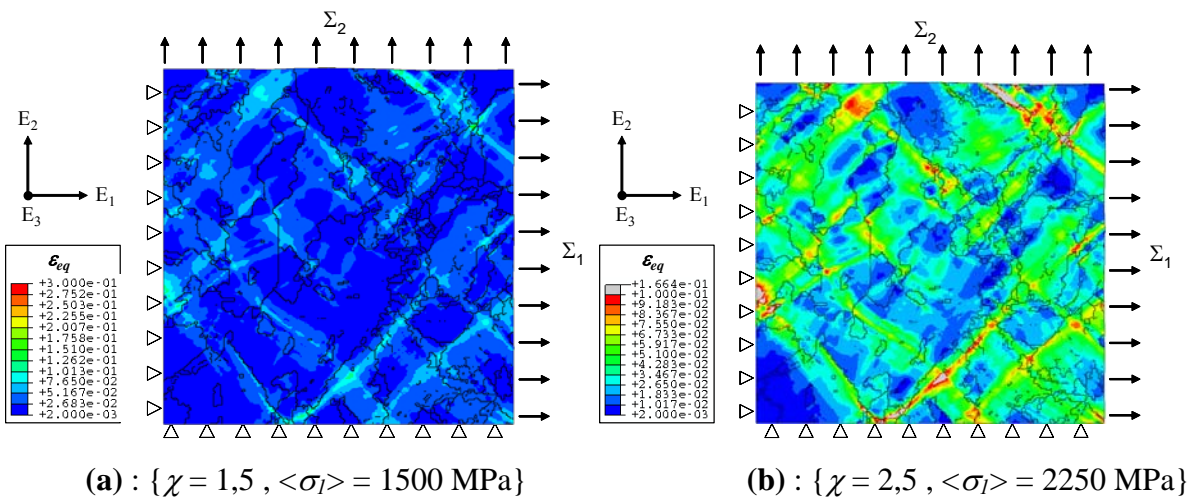
**a) Agrégat n°1**



**Fig. E.7 :** Cartographie  $\varepsilon_{eq}$  à  $T = -60^\circ\text{C}$  :  $\chi = 1,5$  (a) et  $\chi = 2,5$  (b)



**Fig. E.8 :** Cartographie  $\varepsilon_{eq}$  à  $T = -90^\circ\text{C}$  :  $\chi = 1,5$  (a) et  $\chi = 2,5$  (b)



**Fig. E.9 :** Cartographie  $\varepsilon_{eq}$  à  $T = -150^\circ\text{C}$  :  $\chi = 1,5$  (a) et  $\chi = 2,5$  (b).

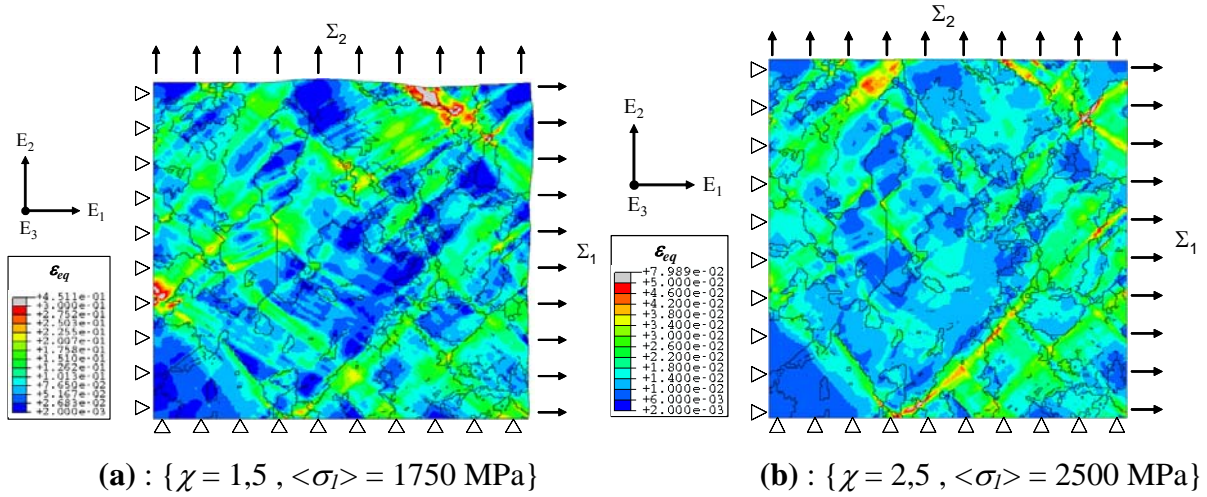


Fig. E.10 : Cartographie  $\sigma_I$  à  $T = -196^\circ\text{C}$  :  $\chi = 1,5$  (a) et  $\chi = 2,5$  (b)

**b) Agrégat n°2**

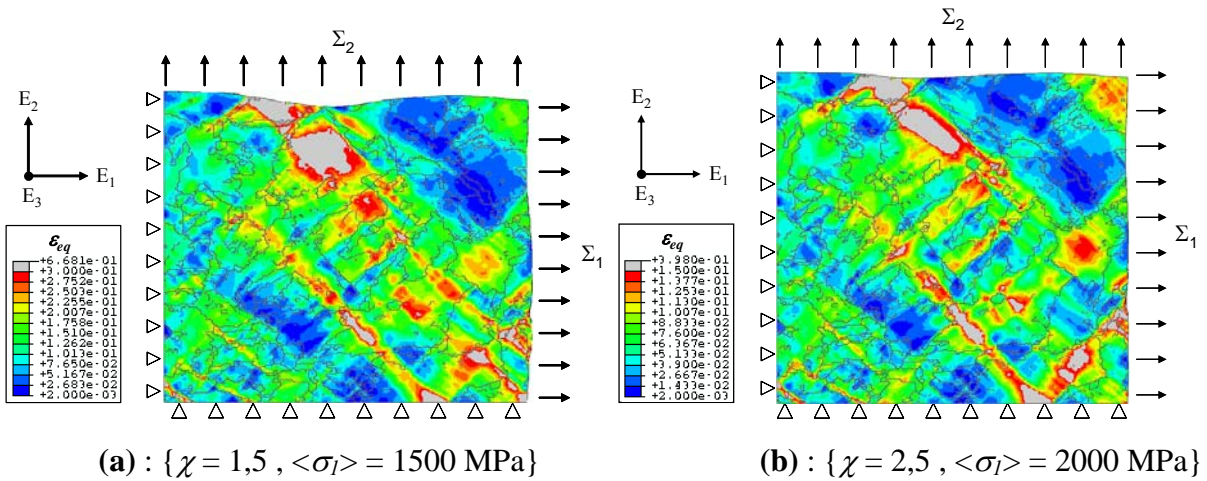


Fig. E.11 : Cartographie  $\varepsilon_{eq}$  à  $T = -90^\circ\text{C}$  :  $\chi = 1,5$  (a) et  $\chi = 2,5$  (b)

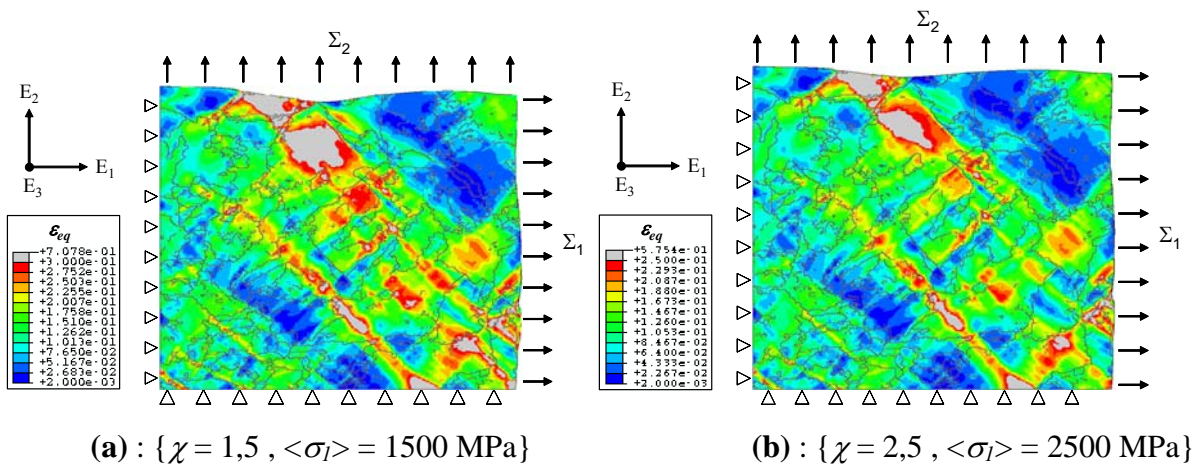


Fig. E.12 : Cartographie  $\varepsilon_{eq}$  à  $T = -150^\circ\text{C}$  :  $\chi = 1,5$  (a) et  $\chi = 2,5$  (b)



### E.1.c Cartographies de contraintes de clivage $\sigma_{\{100\}}$

#### a) Méthode de calcul des contraintes de clivage $\sigma_{\{100\}}$

Le code ABAQUS nous donne en chaque élément le tenseur des contraintes  $\underline{\sigma}$  et la contrainte principale maximale  $\sigma_I$ . Mais d'un point de vue microscopique, cette dernière valeur n'a pas une grande signification, car la rupture par clivage est corrélée à l'orientation des plans de clivage dans chaque grain par rapport aux directions principales. Pour calculer les contraintes normales aux 3 plans de clivage (100), (010) et (001), il faut exprimer l'expression des vecteurs normaux unitaires  $\vec{n}$  à ces trois plans dans le repère macroscopique lié à l'échantillon en utilisant la matrice de passage  $\underline{R}$  du repère microscopique vers le repère macroscopique. On a la relation :

$$\vec{n}^{macro} = \underline{R}^{-1} \cdot \vec{n}^{micro} \quad (E.2)$$

On en déduit l'expression du vecteur contrainte  $\vec{T}(M, \vec{n})$  s'exerçant sur les plans de clivage dans ce repère :

$$\vec{T}(M, \vec{n}) = \underline{\underline{\sigma}}(M) \cdot \vec{n}^{macro} \quad (E.3)$$

Enfin sa composante dite normale au plan de clivage c'est à dire suivant  $\vec{n}$  est donnée par :

$$\Sigma_{\{100\}} = \vec{T}(M, \vec{n}) \cdot \vec{n}^{macro} \quad (E.4)$$

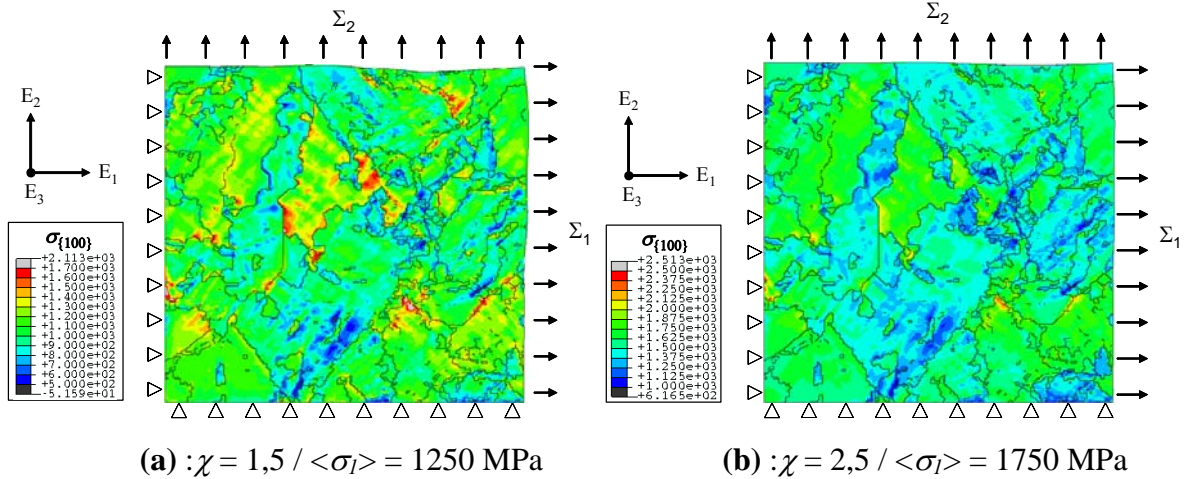
D'où :

$$\sigma_{\{100\}} = \vec{n}^{macro} \cdot \underline{\underline{\sigma}}(M) \cdot \vec{n}^{macro} \quad (E.5)$$

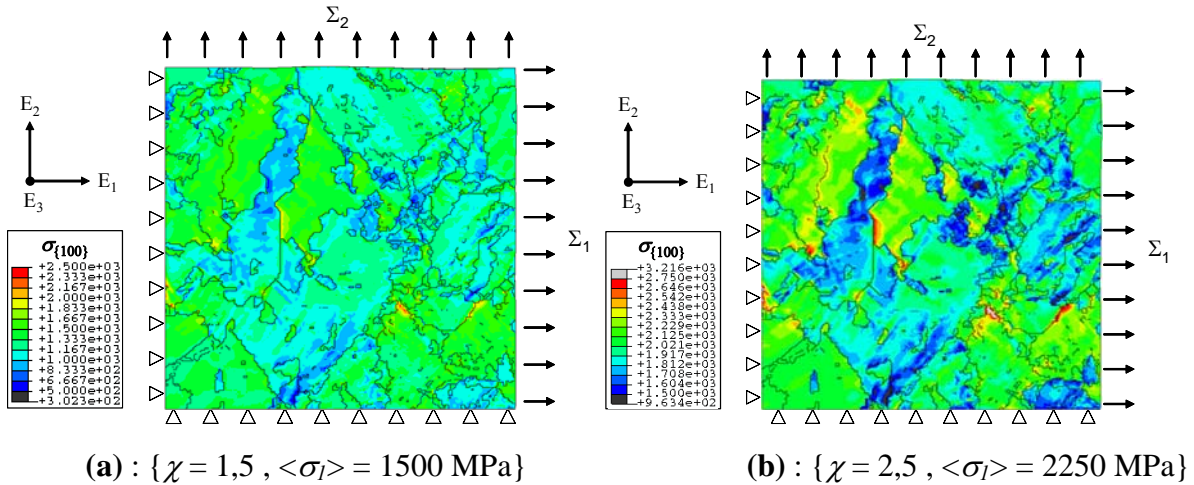
La procédure est automatisée. Toutes les données nécessaires (composantes de  $\underline{\underline{\sigma}}$  et  $\underline{R}$ ) sont enregistrées pour chaque élément et stockées dans un fichier. Le calcul de  $\Sigma_{\{100\}}$  est programmé en fortran et réalisé pour les trois plans (100), (010) et (001). La contrainte de clivage est égale à la plus grande de trois valeurs calculée en chaque élément.

#### b) Cartographies de $\sigma_{\{100\}}$ dans l'agrégat n°1

Comme les contraintes principales, les contraintes de clivage sont localisées à certains joints de paquets de lattes. On observe également un effet d'orientation des grains sur la valeur moyenne de  $\sigma_{\{100\}}$  à l'intérieur des grains, ce qui n'était pas le cas pour les cartographies de  $\sigma_I$  : certains grains voient en moyenne une contrainte de clivage beaucoup plus élevée que d'autres. La température et la triaxialité ont un effet sur l'intensité des localisations, mais pas sur leur localisation, qui est surtout conditionnée par la microstructure.



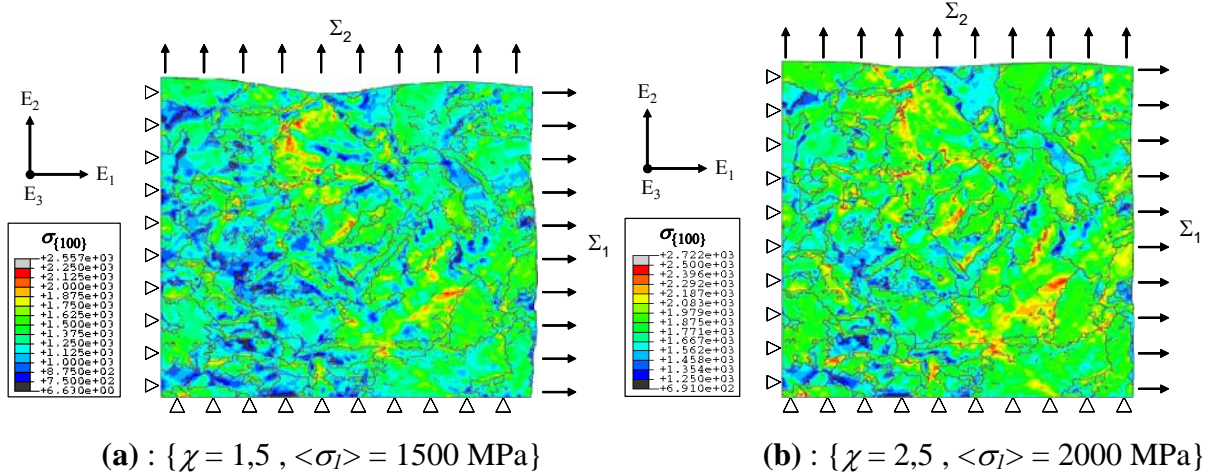
**Fig. E.13 :** Cartographie  $\sigma_{l100}$  à  $T = -60^\circ\text{C}$  :  $\chi = 1,5$  (a) et  $\chi = 2,5$  (b)



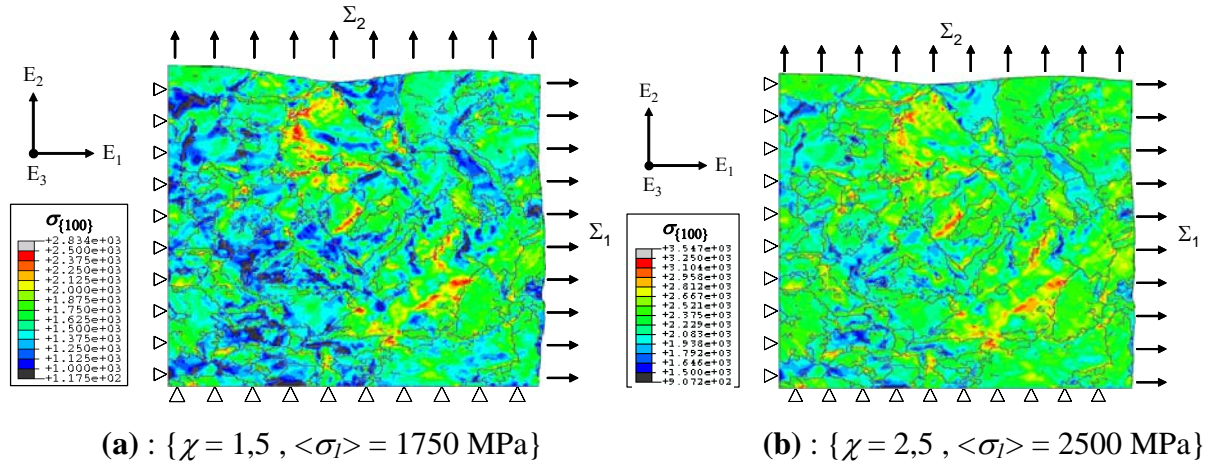
**Fig. E.14 :** Cartographie  $\sigma_{l100}$  à  $T = -150^\circ\text{C}$  :  $\chi = 1,5$  (a) et  $\chi = 2,5$  (b)

### c) Cartographies de $\sigma_{l100}$ dans l'agrégat n°2

Les remarques sont les mêmes que pour l'agrégat n°1. On constate que les localisations de  $\sigma_{l100}$  sont situées surtout aux joints de paquets de lattes, et la comparaison avec l'agrégat n°1 ( $T = -150^\circ\text{C}$ ) montre que ces localisations sont essentiellement conditionnées par la microstructure. Il faut noter que pour le calcul à  $T = -150^\circ\text{C} / \chi = 1,5$ , l'état de contraintes  $\langle \sigma_l \rangle = 1750 \text{ MPa}$  est atteint uniquement avec l'agrégat n°2 (le calcul diverge avec l'agrégat n°1).



**Fig. E.15** : Cartographie  $\sigma_{I100}$  à  $T = -90^\circ\text{C}$  :  $\chi = 1,5$  (a) et  $\chi = 2,5$  (b)



**Fig. E.16** : Cartographie  $\sigma_{I100}$  à  $T = -150^\circ\text{C}$  :  $\chi = 1,5$  (a) et  $\chi = 2,5$  (b)

## E.2 Résultats de simulation numérique : histogrammes de distribution de $\sigma_I$ et $\sigma_{I100}$

Les cartographies de contrainte principale maximale  $\sigma_I$  ne permettant d'obtenir que des informations qualitatives, nous nous sommes basés sur les distributions de contraintes pour formuler un critère de description des hétérogénéités. Par la suite, tous les histogrammes sont réalisés de la façon suivante : le spectre des valeurs de  $\sigma_I$  est décomposé en 100 classes de valeurs. On compte le nombre d'éléments  $N_{elt}$  inclus dont la valeur est incluse dans chaque classe, puis on en déduit la fréquence  $\nu$  de chaque classe :

$$\nu = \frac{N_{elt}}{N_{tot}} \quad (\text{E.6})$$

Où  $N_{tot}$  désigne le nombre total d'éléments dans l'agrégat. On fait l'hypothèse de conservation du volume des éléments au cours de la sollicitation, ce qui n'est pas rigoureusement valable en élasto-plasticité. Cependant, on fait l'hypothèse que les déformations élastiques restent

faibles devant les déformations plastiques. Les histogrammes de contraintes sont tracés pour les deux agrégats simulés numériquement ainsi que pour chaque étape du chargement.

### E.2.a Distribution des contraintes principales maximales $\sigma_I$

#### a) Distributions de $\sigma_I$ dans l'agrégat n°1

Quatre valeurs de température ( $T = -60^\circ\text{C}$ ,  $-90^\circ\text{C}$ ,  $-150^\circ\text{C}$  et  $-196^\circ\text{C}$ ) ainsi que deux niveaux de triaxialité ( $\chi = 1,5$  et  $2,5$ ) sont étudiés.

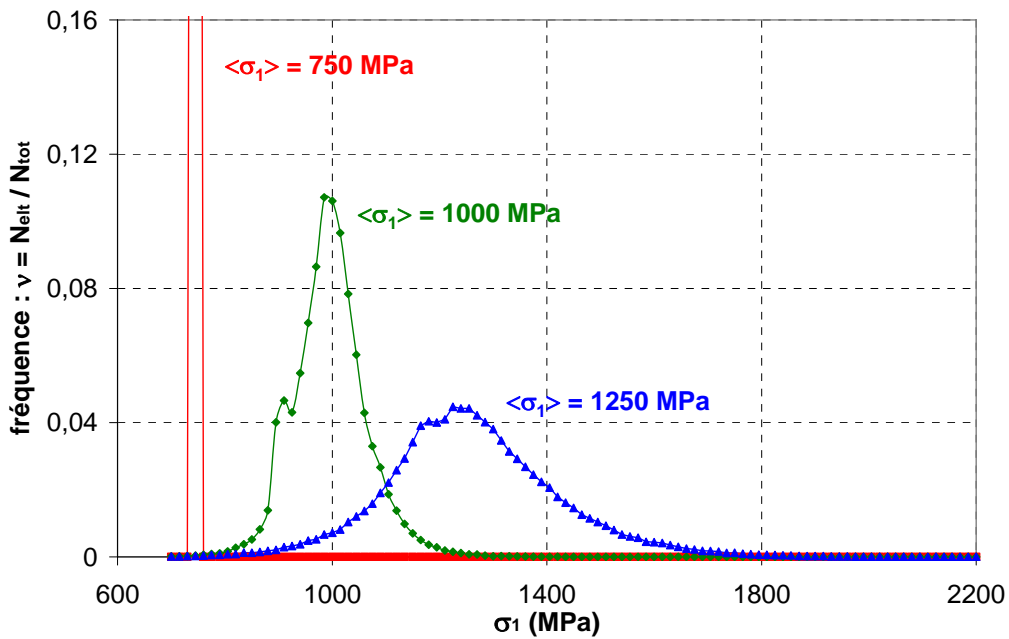


Fig. E.17 : Histogramme  $\sigma_I$  à  $\{T = -60^\circ\text{C}, \chi = 1,5\}$

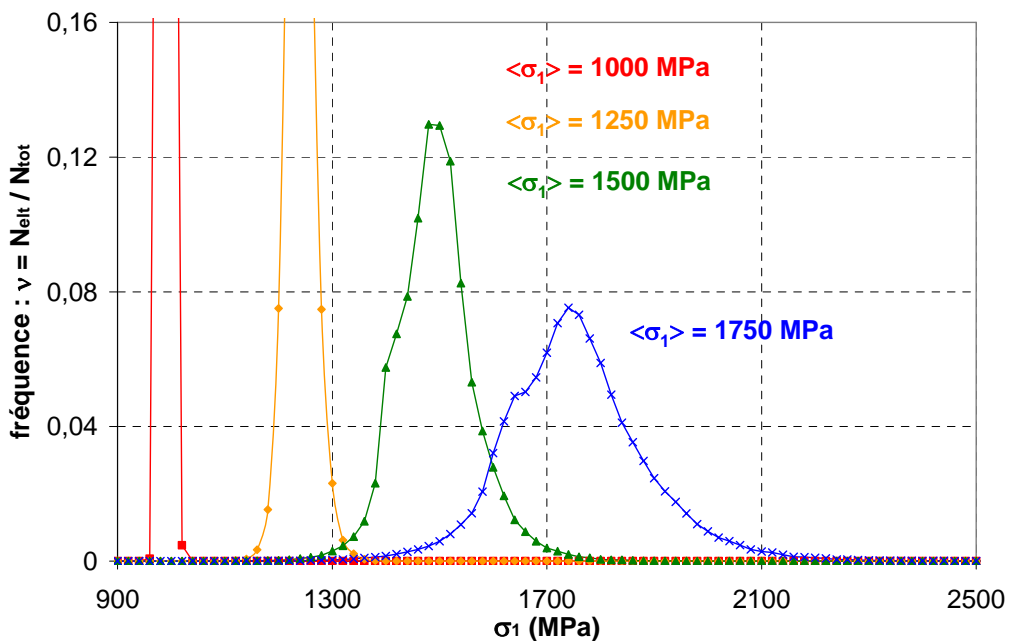


Fig. E.18 : Histogramme  $\sigma_I$  à  $\{T = -60^\circ\text{C}, \chi = 2,5\}$

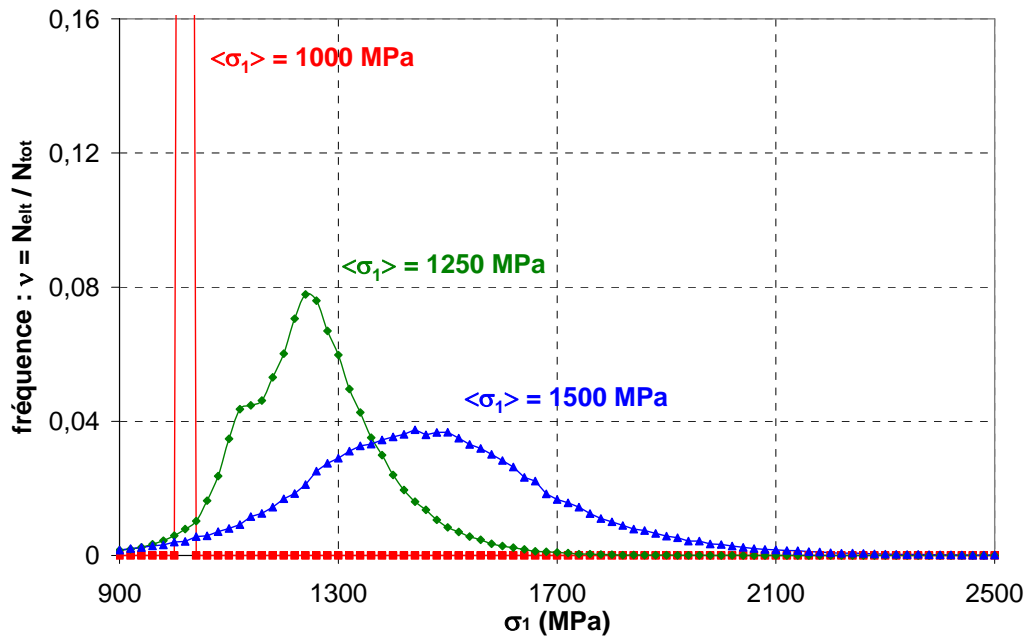


Fig. E.19 : Histogramme  $\sigma_1$  à  $\{T = -90^\circ\text{C} , \chi = 1,5\}$

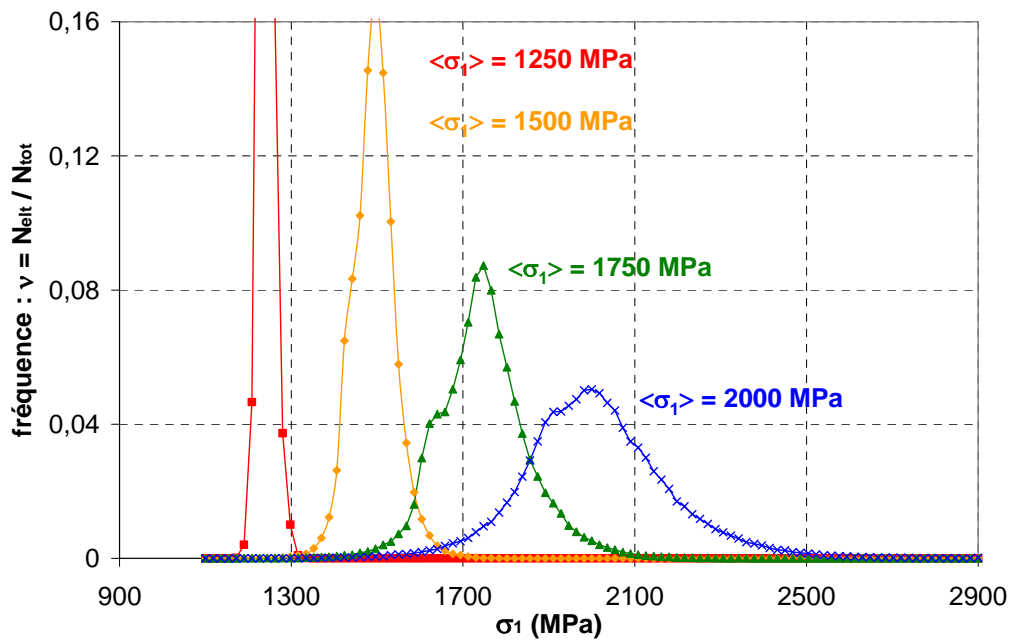


Fig. E.20 : Histogramme  $\sigma_1$  à  $\{T = -90^\circ\text{C} , \chi = 2,5\}$

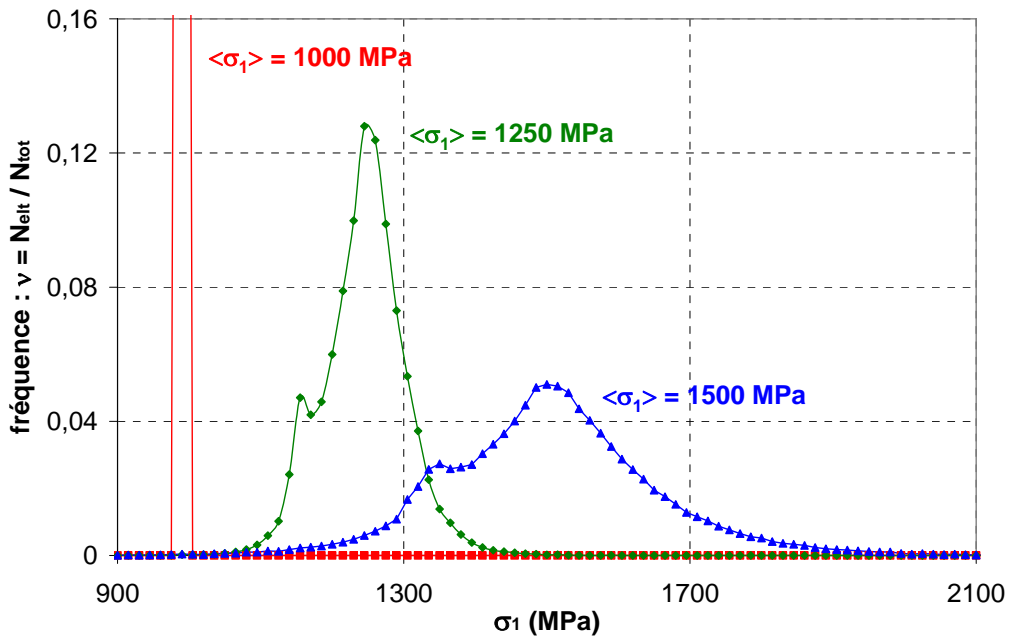


Fig. E.21 : Histogramme  $\sigma_1$  à  $\{T = -150^\circ\text{C} , \chi = 1,5\}$

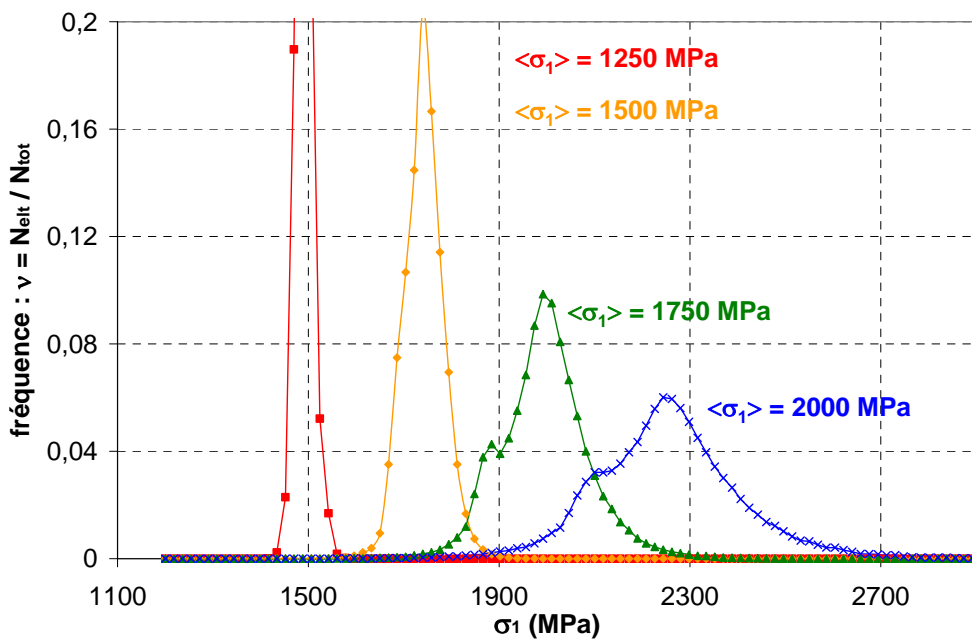
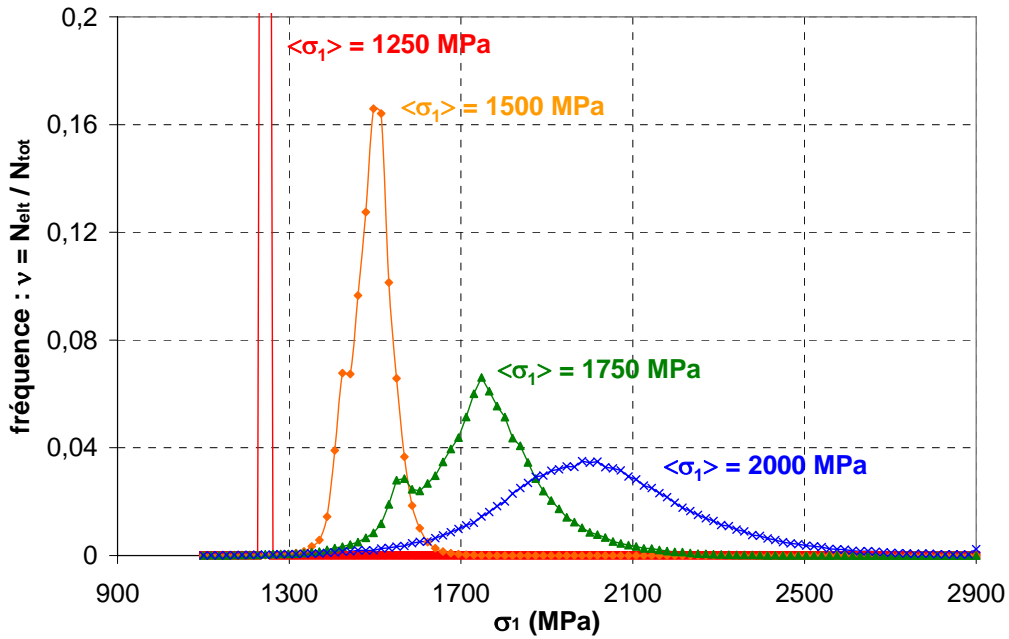
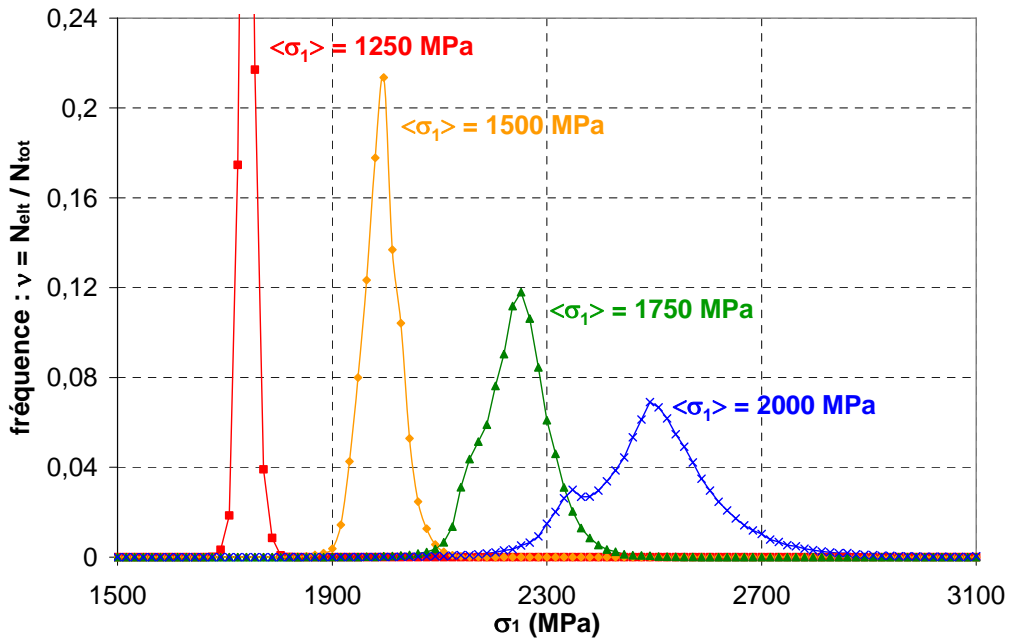


Fig. E.22 : Histogramme  $\sigma_1$  à  $\{T = -150^\circ\text{C} , \chi = 2,5\}$



**Fig. E.23 :** Histogramme  $\sigma_I$  à  $\{T = -196^\circ\text{C} , \chi = 1,5\}$



**Fig. E.24 :** Histogramme  $\sigma_I$  à  $\{T = -196^\circ\text{C} , \chi = 2,5\}$

Les résultats montrent que la largeur des distributions à mi-hauteur augmente avec le chargement. Globalement, on atteint un niveau d'hétérogénéités plus grand pour les simulations à  $\chi = 1,5$ . Par contre, les histogrammes ne permettent pas de conclure à un effet évident de la température sur les distributions de  $\sigma_I$  : il faudrait en effet découpler l'influence des divers paramètres de chargement ( $\langle \varepsilon_{eq} \rangle, T, \chi$ ).

b) Distributions de  $\sigma_I$  dans l'agrégat n°2

Pour l'agrégat n°2, deux valeurs de  $T$  ( $-90^\circ\text{C}$  et  $-150^\circ\text{C}$ ), ainsi que deux niveaux de triaxialité ( $\chi = 1,5$  et  $2,5$ ) sont étudiés.

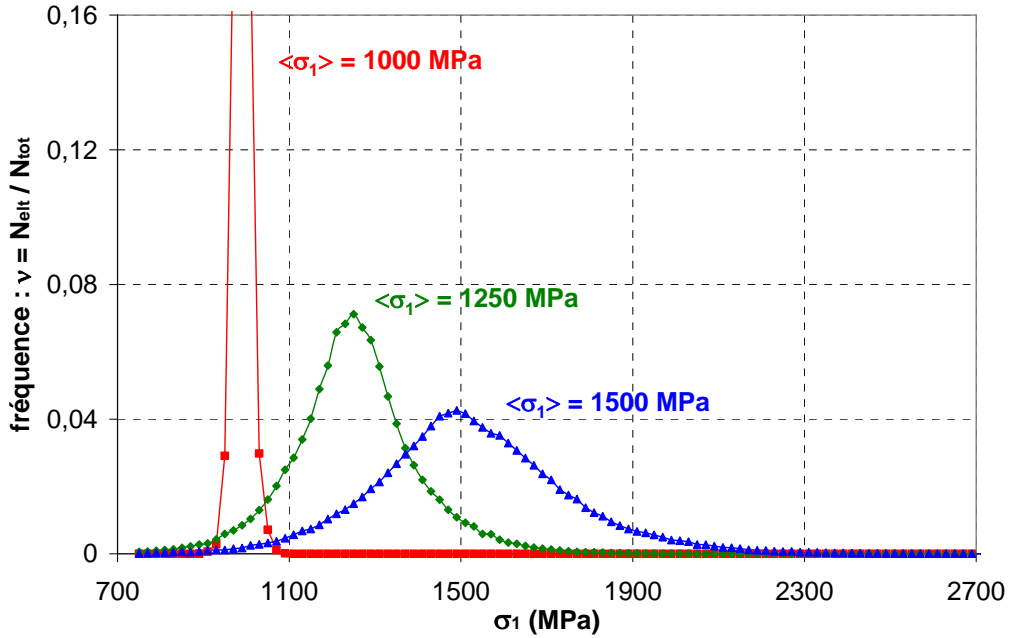


Fig. E.25 : Histogramme  $\sigma_I$  à  $\{T = -90^\circ\text{C}, \chi = 1,5\}$

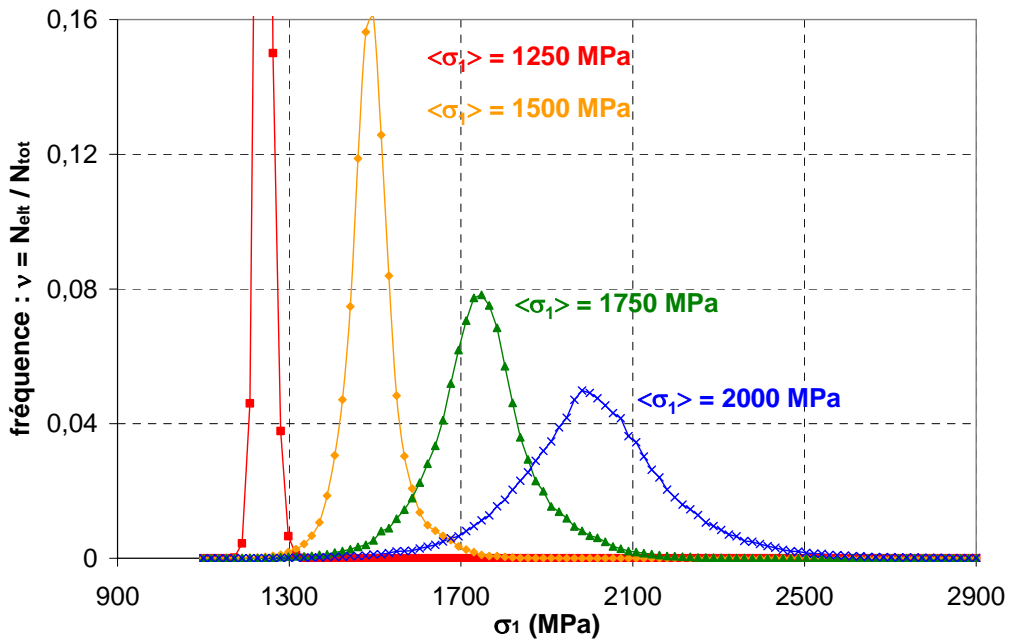


Fig. E.26 : Histogramme  $\sigma_I$  à  $\{T = -90^\circ\text{C}, \chi = 2,5\}$



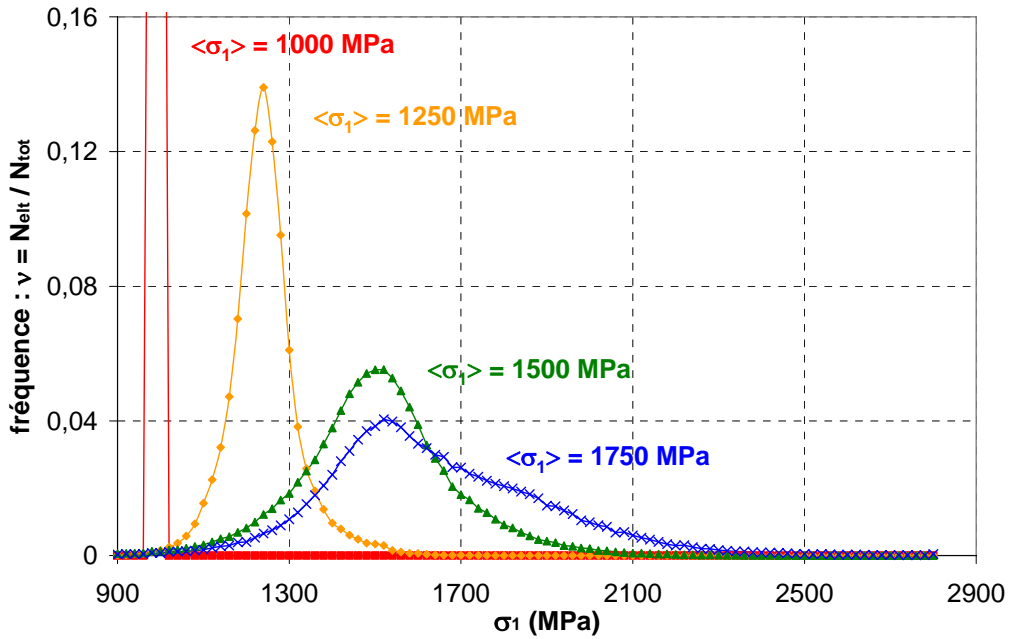


Fig. E.27 : Histogramme  $\sigma_1$  à  $\{T = -150^\circ\text{C}, \chi = 1,5\}$

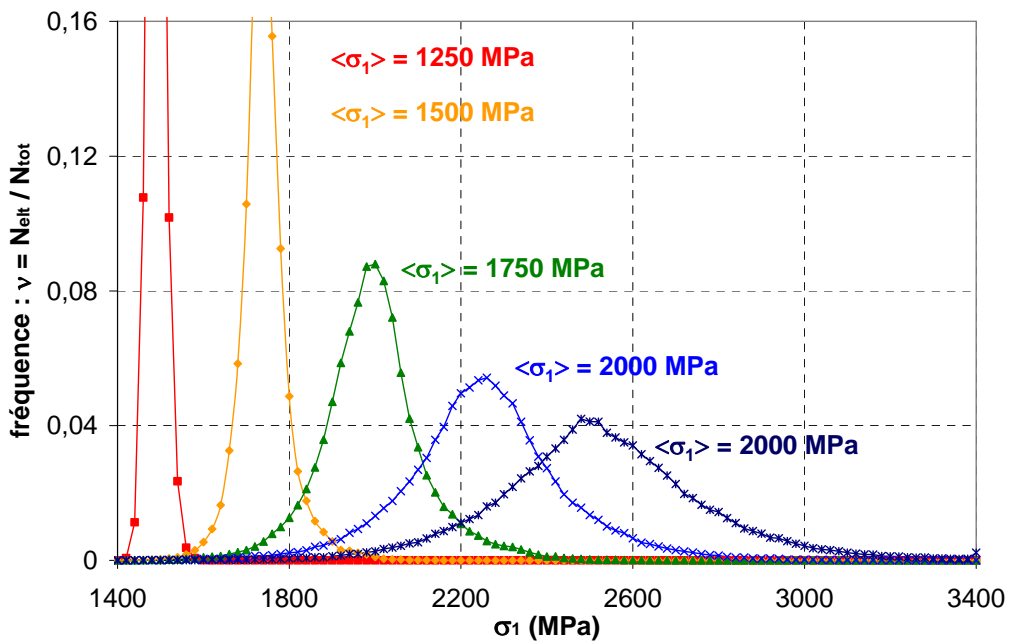


Fig. E.28 : Histogramme  $\sigma_1$  à  $\{T = -150^\circ\text{C}, \chi = 2,5\}$

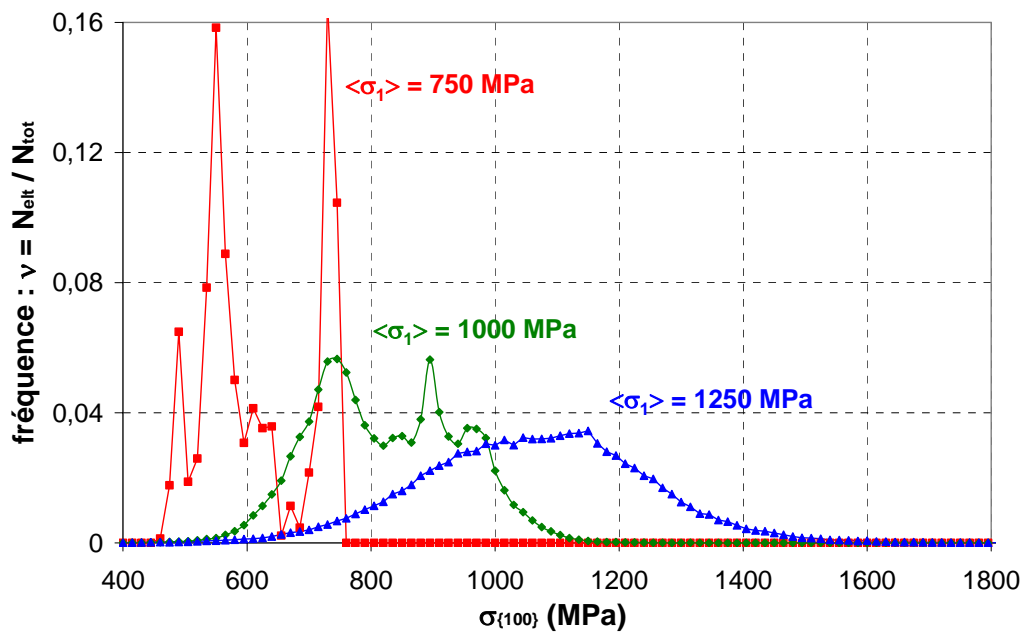
Les remarques sont les mêmes que pour l'agrégat n°1 quant à l'effet du chargement sur les distributions de  $\sigma_1$ . La comparaison des distributions obtenues pour les agrégats n°1 et n°2, qui fait l'objet du paragraphe E.2.d, a pour objectif d'apporter des éléments sur la notion de taille d'agrégat représentative vis-à-vis de l'étude des distributions de  $\sigma_1$ .

**E.2.b Distribution des contraintes de clivage  $\sigma_{\{100\}}$** 

La même démarche a été appliquée pour obtenir les histogrammes de contraintes de clivage  $\sigma_{\{100\}}$  dans chaque agrégat.

**a) Distributions de  $\sigma_{\{100\}}$  dans l'agrégat n°1**

Il était nécessaire de définir  $\sigma_{\{100\}}$  en tant que variable d'état du modèle, et donc de reprendre les simulations numériques d'agrégat pour étudier spécifiquement les distributions de  $\sigma_{\{100\}}$ . C'est pour cette raison que seules deux valeurs de température sont étudiées ( $T = -90^\circ\text{C}$  et  $-150^\circ\text{C}$ ). Les deux niveaux de triaxialité ( $\chi = 1,5$  et  $2,5$ ) sont traités.



**Fig. E.29** : Histogramme  $\sigma_{\{100\}}$  à  $\{T = -60^\circ\text{C}, \chi = 1,5\}$  (agrégat n°1)

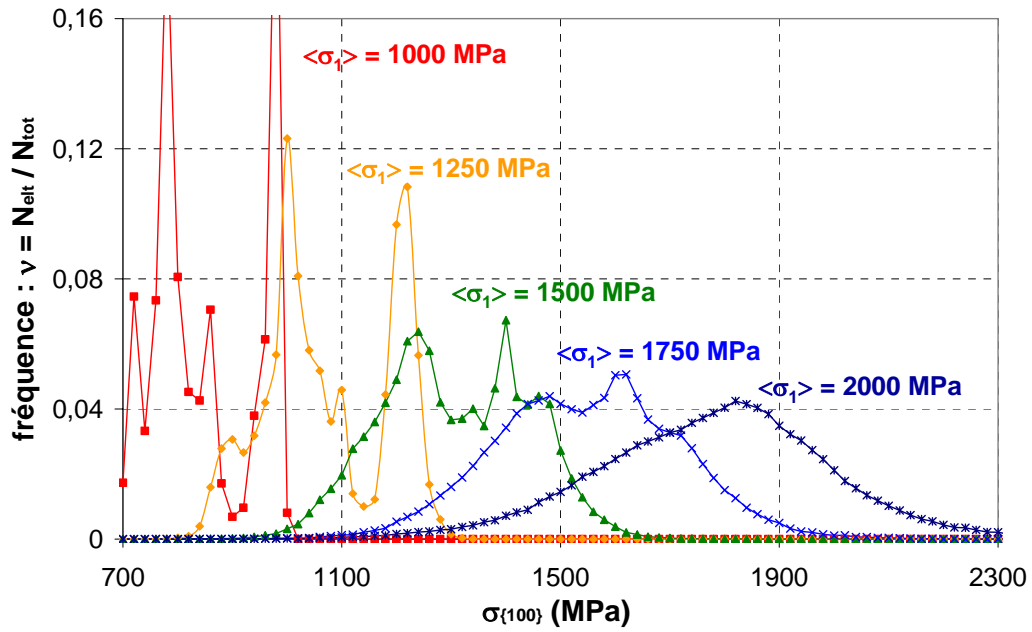


Fig. E.30 : Histogramme  $\sigma_{l100}$  à  $\{T = -60^\circ\text{C}, \chi = 2,5\}$  (agrégat n°1)

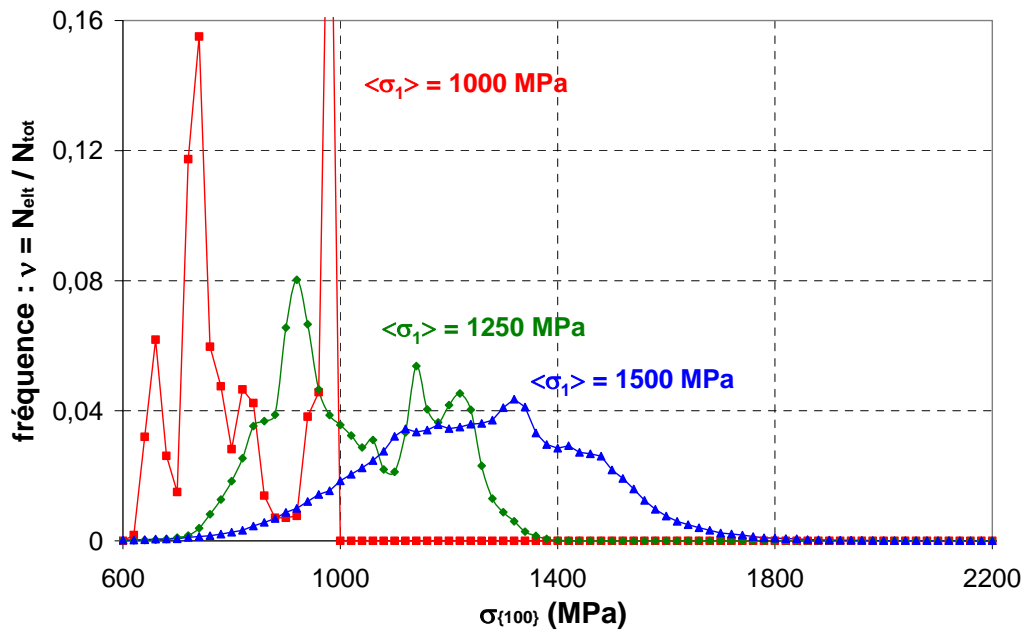
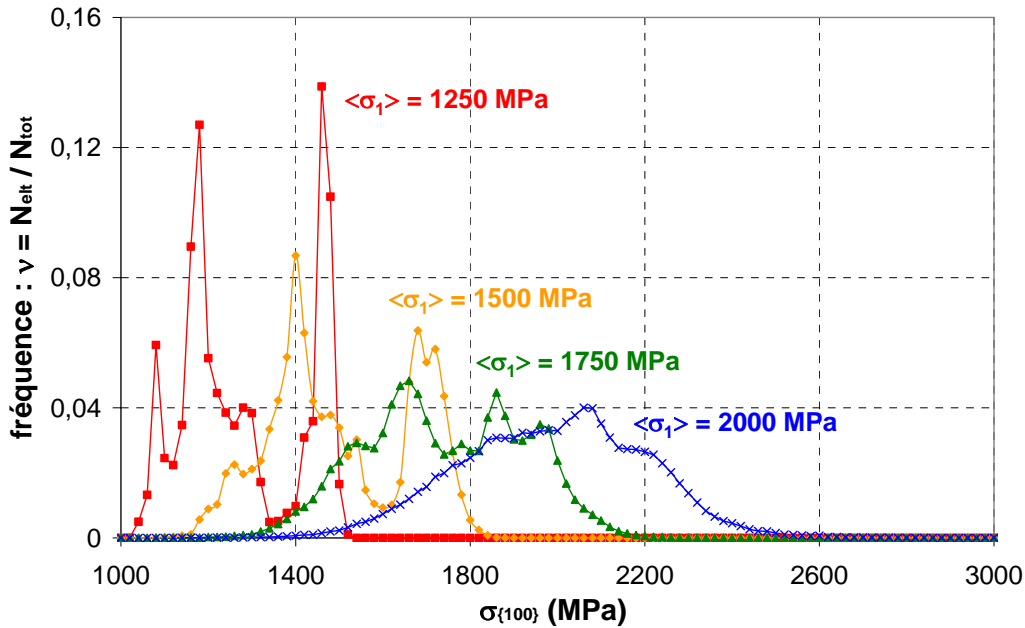


Fig. E.31 : Histogramme  $\sigma_{l100}$  à  $\{T = -150^\circ\text{C}, \chi = 1,5\}$  (agrégat n°1)



**Fig. E.32 :** Histogramme  $\sigma_{i100}$  à  $\{T = -150^{\circ}\text{C}, \chi = 1,5\}$  (agrégat n°1)

Les distributions de  $\sigma_{i100}$  sont plus ‘bruitées’ que celles de  $\sigma_i$ . Cet effet est lié à la prise en compte des orientations cristallines lors du calcul de  $\sigma_{i100}$ . On note toutefois que le caractère erratique des valeurs de  $\sigma_{i100}$  tend à s’estomper lorsque la déformation augmente.

On constate également un décalage des distributions de  $\sigma_{i100}$  vers les valeurs de contraintes plus faibles par rapport aux distributions de  $\sigma_i$ . Pour interpréter ce décalage, on peut invoquer l’explication suivante  $\sigma_{i100}$  est égale à  $\sigma_i$  si l’un des 3 plans de clivage coïncide avec la direction principale. En somme, seule une petite fraction des paquets de lattes soumis à de fortes valeurs de  $\sigma_i$  va être orientée favorablement par rapport au clivage. Une comparaison des histogrammes de  $\sigma_{i100}$  et  $\sigma_i$  est présentée plus loin dans le chapitre E.2.c.

### b) Distributions de $\sigma_{i100}$ dans l’agrégat n°2

Les histogrammes de  $\sigma_{i100}$  ont également été tracés pour l’ensemble des simulations numériques réalisées avec la microstructure d’agrégat n°2 ( $T = -90^{\circ}\text{C}$  et  $-150^{\circ}\text{C}$  /  $\chi = 1,5$  et  $2,5$ ).

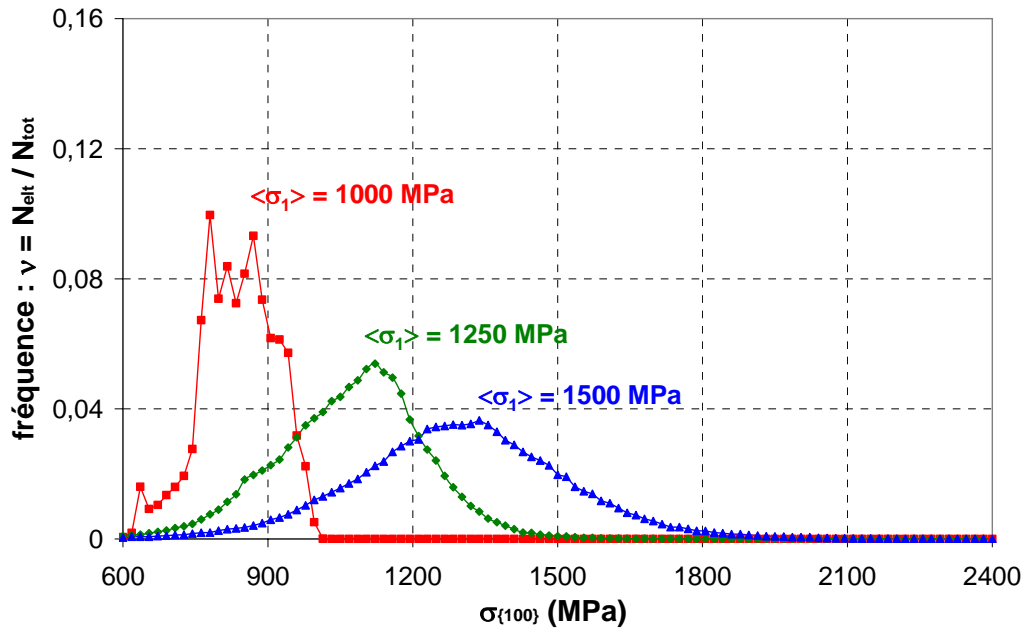


Fig. E.33 : Histogramme  $\sigma_{l100}$  à  $\{T = -90^\circ\text{C} , \chi = 1,5\}$  (agrégat n<sup>2</sup>)

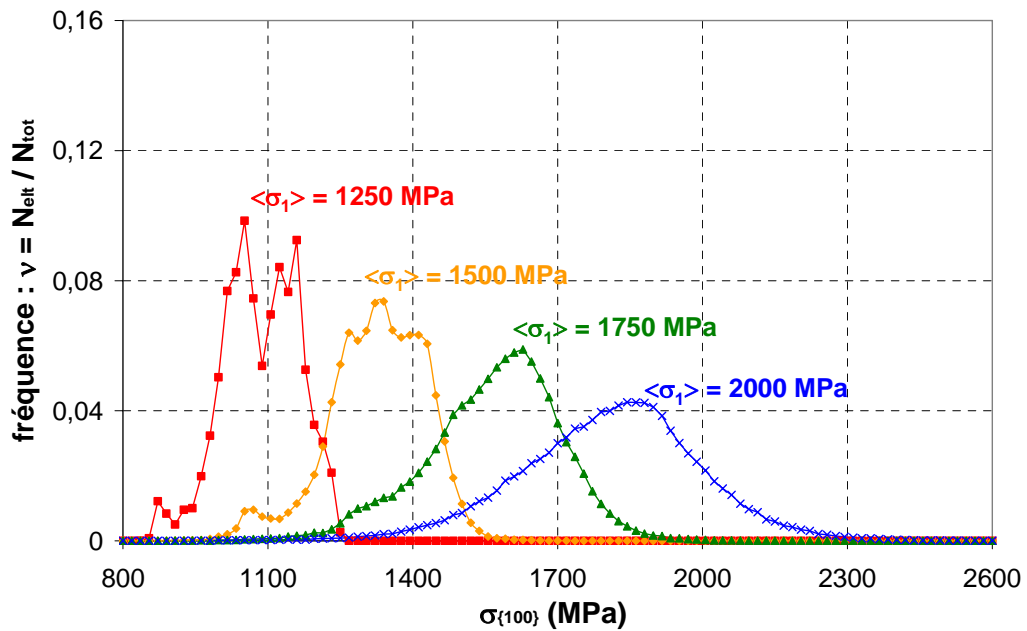


Fig. E.34 : Histogramme  $\sigma_{l100}$  à  $\{T = -90^\circ\text{C} , \chi = 2,5\}$  (agrégat n<sup>2</sup>)

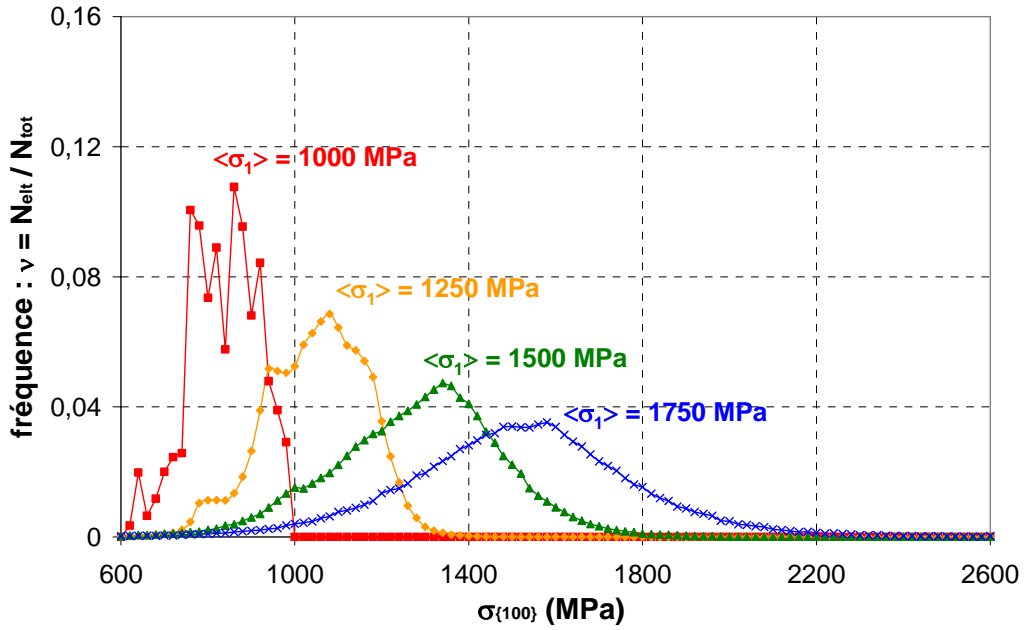


Fig. E.35 : Histogramme  $\sigma_{l100}$  à  $\{T = -150^\circ\text{C}, \chi = 1,5\}$  (agrégat n°2)

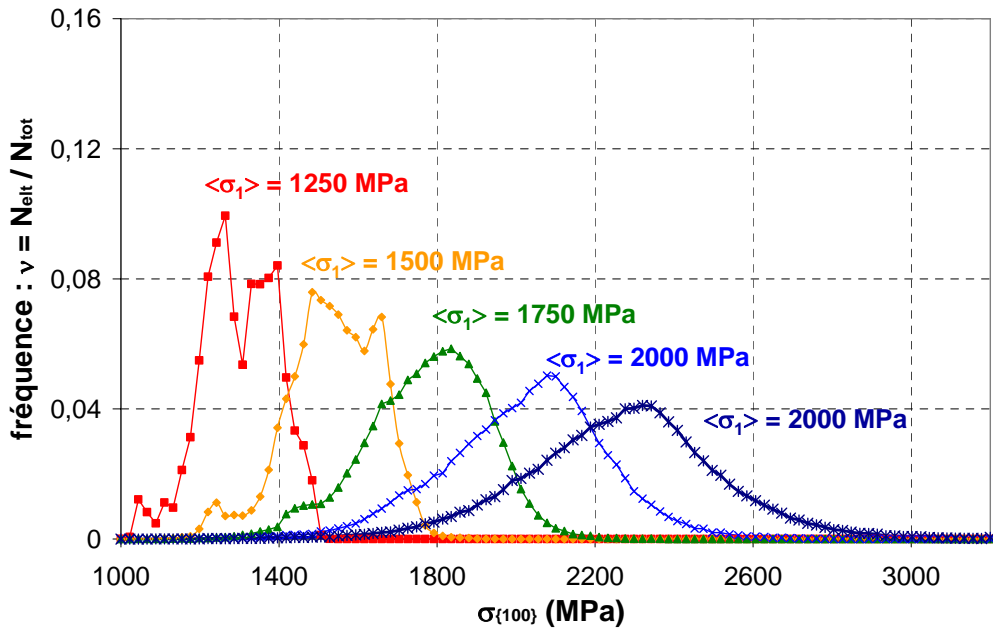
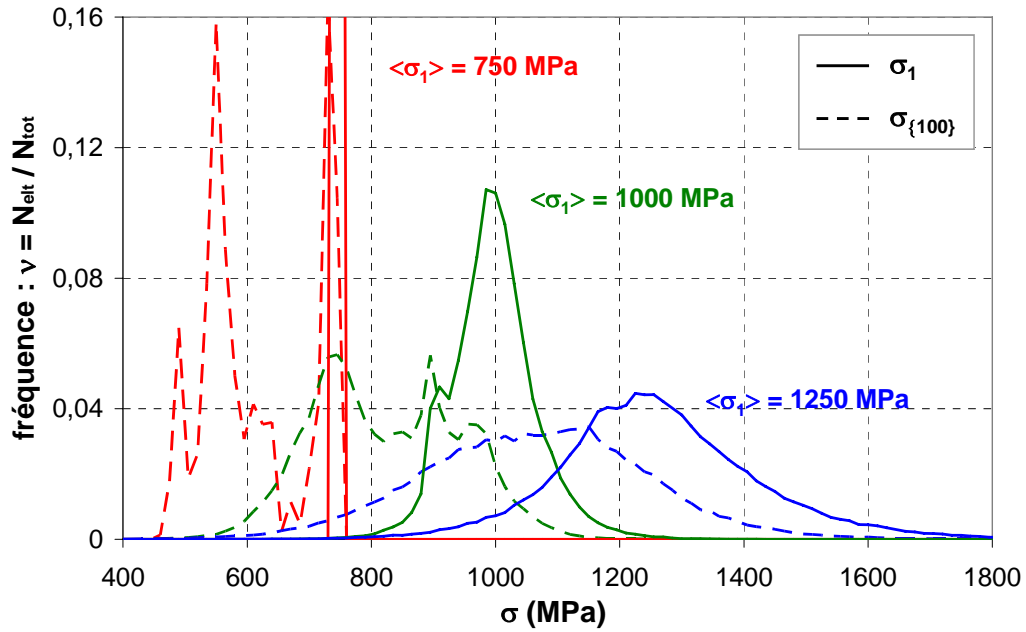
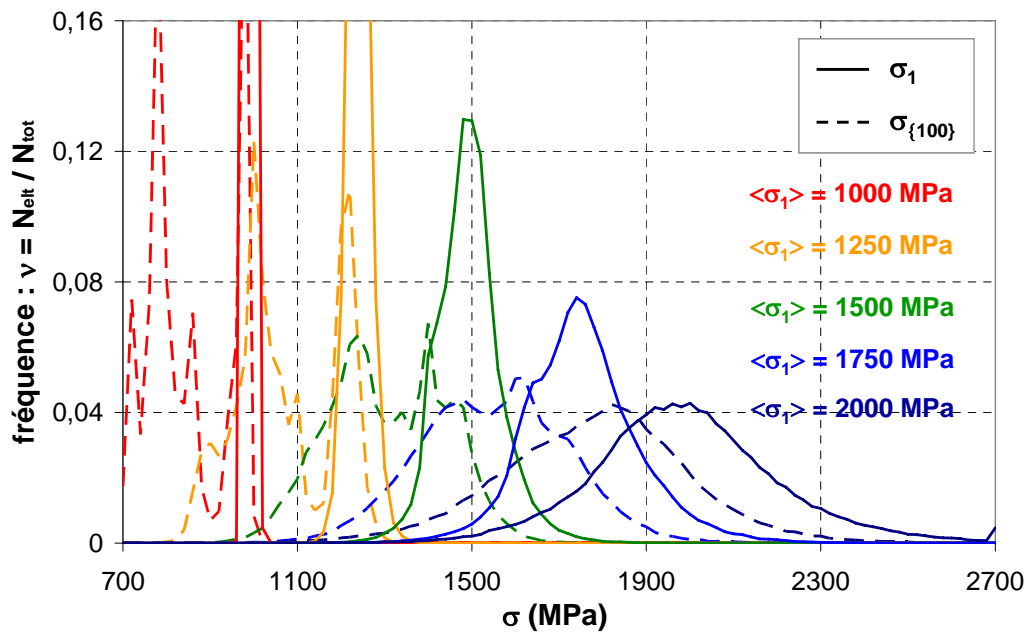


Fig. E.36 : Histogramme  $\sigma_{l100}$  à  $\{T = -150^\circ\text{C}, \chi = 2,5\}$  (agrégat n°2)

Les remarques formulées en ce qui concerne l'agrégat n°1 sont ici toujours valables. L'effet de la microstructure sur les distributions de  $\sigma_{l100}$  est étudié dans le chapitre E.2.d, afin de discuter de la représentativité vis-à-vis des distributions de  $\sigma_{l100}$  d'un agrégat de taille  $200 \times 200 \mu\text{m}^2$ .

E.2.c Comparaison  $\sigma_I / \sigma_{\{100\}}$ a) Comparaison  $\sigma_I / \sigma_{\{100\}}$  dans l'agrégat n°1Fig. E.37 : Comparaison  $\sigma_I / \sigma_{\{100\}}$  à  $\{T = -60^\circ\text{C}, \chi = 1,5\}$  (agrégat n°1)Fig. E.38 : Comparaison  $\sigma_I / \sigma_{\{100\}}$  à  $\{T = -60^\circ\text{C}, \chi = 2,5\}$  (agrégat n°1)

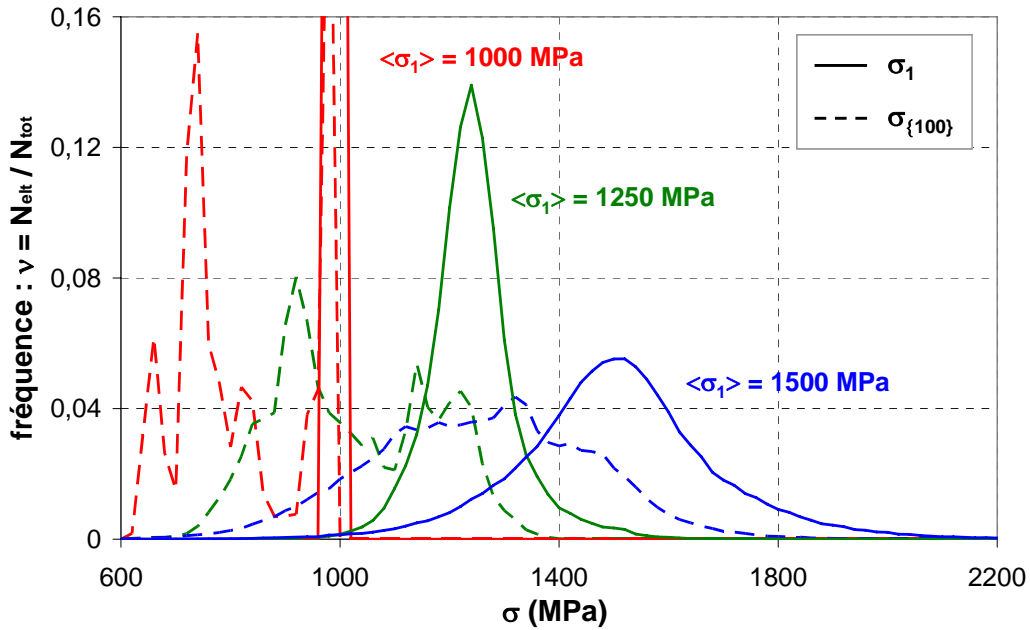


Fig. E.39 : Comparaison  $\sigma_1 / \sigma_{\{100\}}$  à  $\{T = -150^\circ\text{C}, \chi = 1,5\}$  (agrégat n°1)

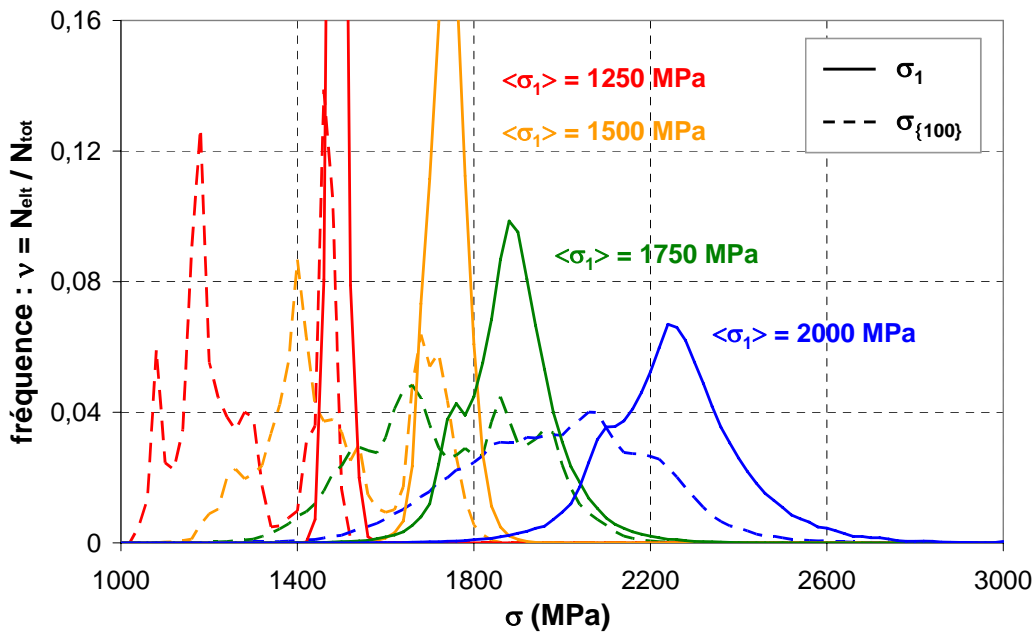


Fig. E.40 : Comparaison  $\sigma_1 / \sigma_{\{100\}}$  à  $\{T = -150^\circ\text{C}, \chi = 2,5\}$  (agrégat n°1)

Même pour les états très hétérogènes (les plus sollicités), les queues de distributions de  $\sigma_{\{100\}}$  présentent un aspect très différent de celles de  $\sigma_1$ . Non seulement, il y a un décalage entre les valeurs de  $\sigma_1$  et celles de  $\sigma_{\{100\}}$ , mais l'allure de la fonction de distribution de  $\sigma_{\{100\}}$  reste assez erratique.



b) Comparaison  $\sigma_1 / \sigma_{\{100\}}$  dans l'agrégat n°2

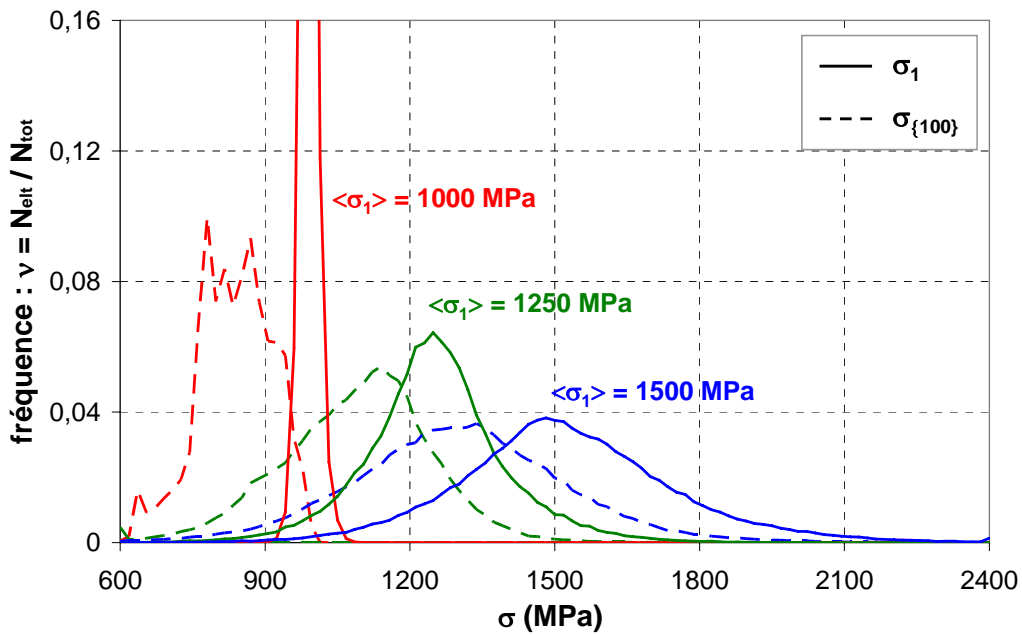


Fig. E.41 : Comparaison  $\sigma_1 / \sigma_{\{100\}}$  à  $\{T = -90^\circ\text{C}, \chi = 1,5\}$  (agrégat n°2)

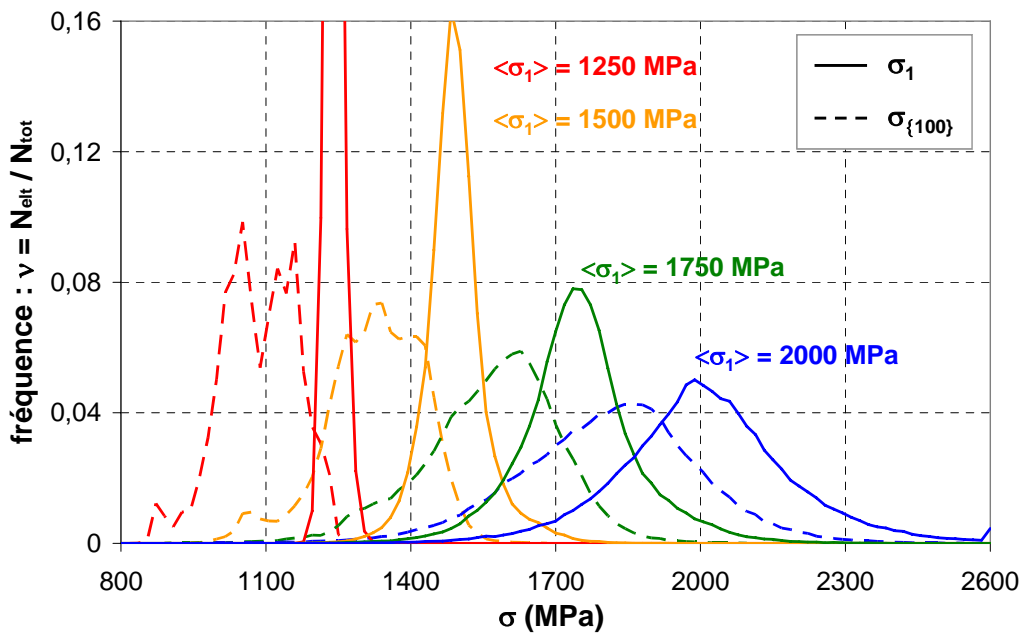


Fig. E.42 : Comparaison  $\sigma_1 / \sigma_{\{100\}}$  à  $\{T = -90^\circ\text{C}, \chi = 2,5\}$  (agrégat n°2)

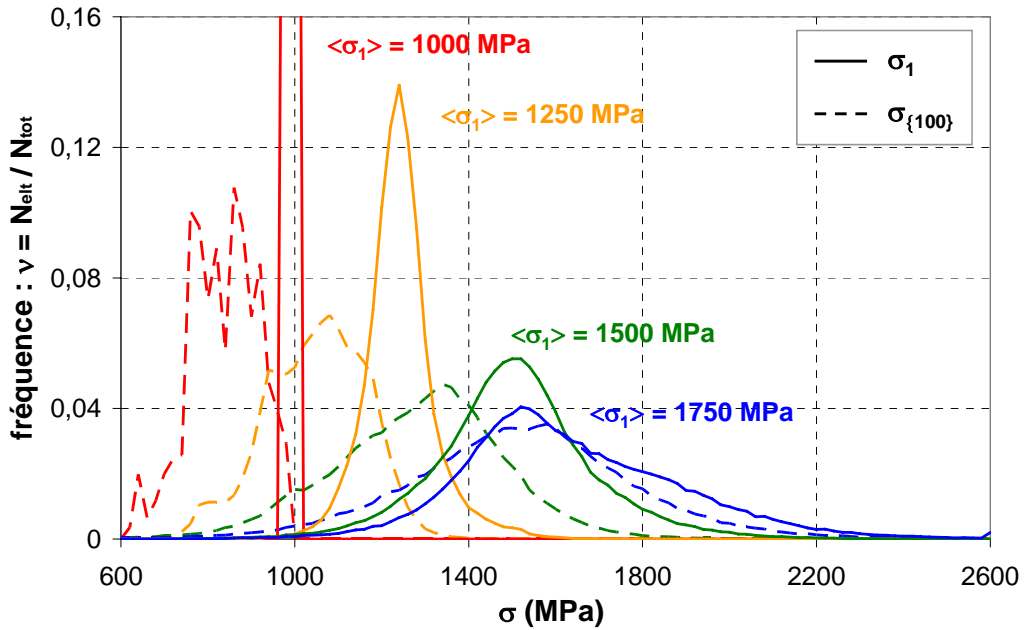


Fig. E.43 : Comparaison  $\sigma_1 / \sigma_{\{100\}}$  à  $\{T = -150^\circ\text{C}, \chi = 1,5\}$  (agrégat n°2)

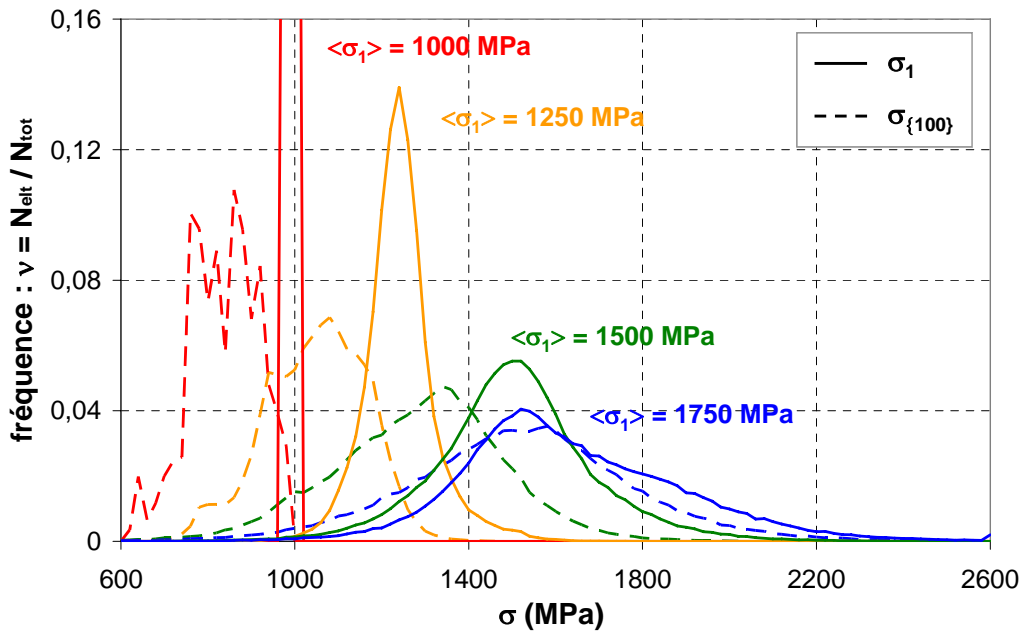


Fig. E.44 : Comparaison  $\sigma_1 / \sigma_{\{100\}}$  à  $\{T = -150^\circ\text{C}, \chi = 2,5\}$  (agrégat n°2)

Les conclusions sont les mêmes pour l'agrégat n°2 : les distributions de  $\sigma_1$  et  $\sigma_{\{100\}}$  sont très différentes. En faisant une comparaison à  $T$  et  $\chi$  fixés, on note que les histogrammes de contrainte de clivage  $\sigma_{\{100\}}$  sont très différents entre les agrégats n°1 et n°2 pour les états peu sollicités. Une comparaison des distributions de  $\sigma_{\{100\}}$  est proposée dans le chapitre E.2.d.

E.2.d Comparaison agrégat n°1 / agrégat n°2

a) Comparaison des distributions de  $\sigma_I$

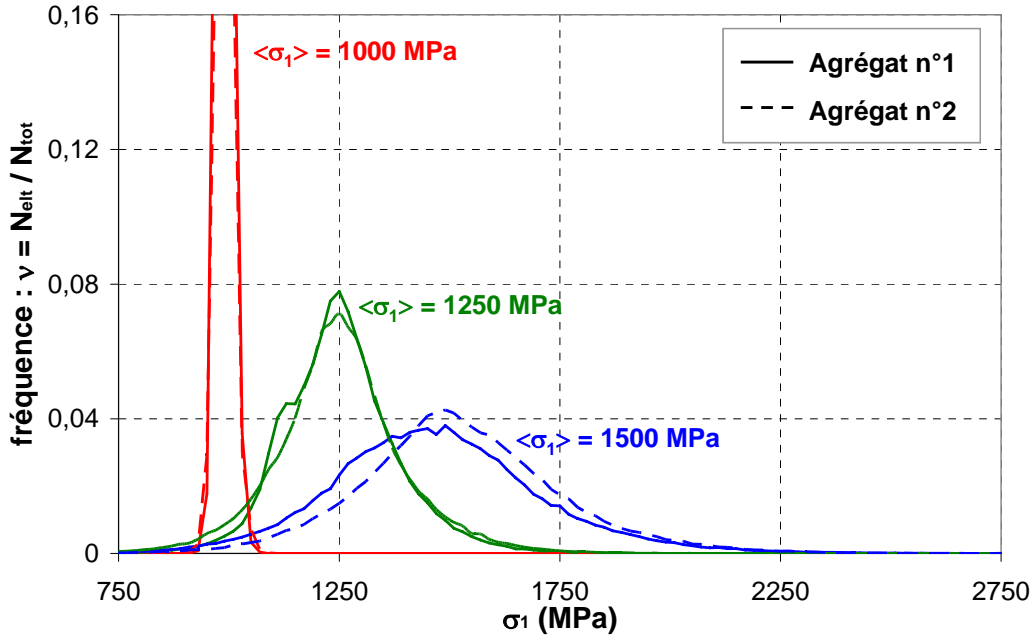


Fig. E.45 : Comparaison des histogrammes de  $\sigma_I$  pour  $\{T = -90^\circ\text{C}, \chi = 1,5\}$

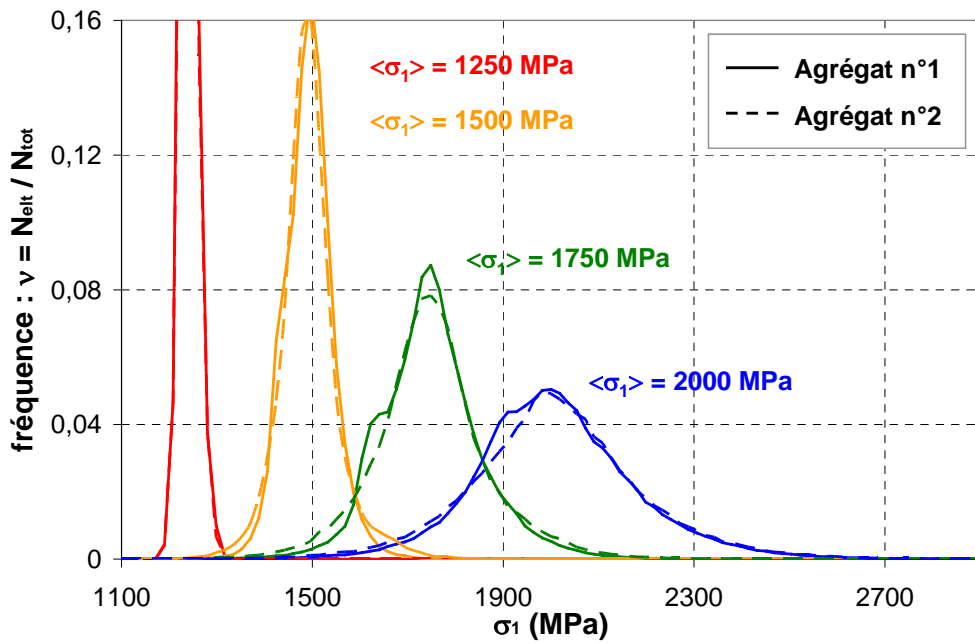


Fig. E.46 : Comparaison des histogrammes de  $\sigma_I$  pour  $\{T = -90^\circ\text{C}, \chi = 2,5\}$

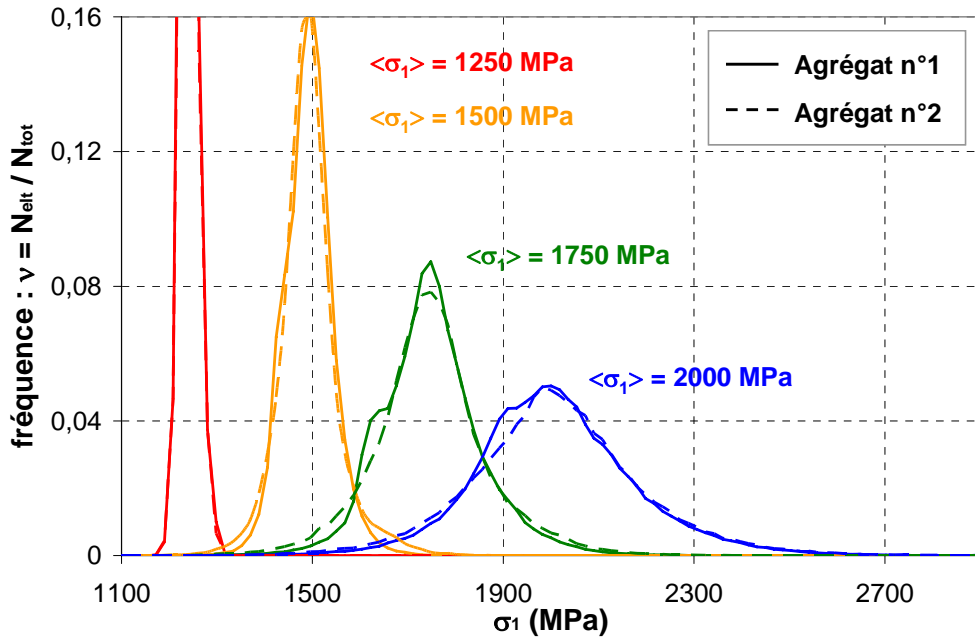


Fig. E.47 : Comparaison des histogrammes de  $\sigma_I$  pour  $\{T = -150^\circ\text{C}, \chi = 1,5\}$

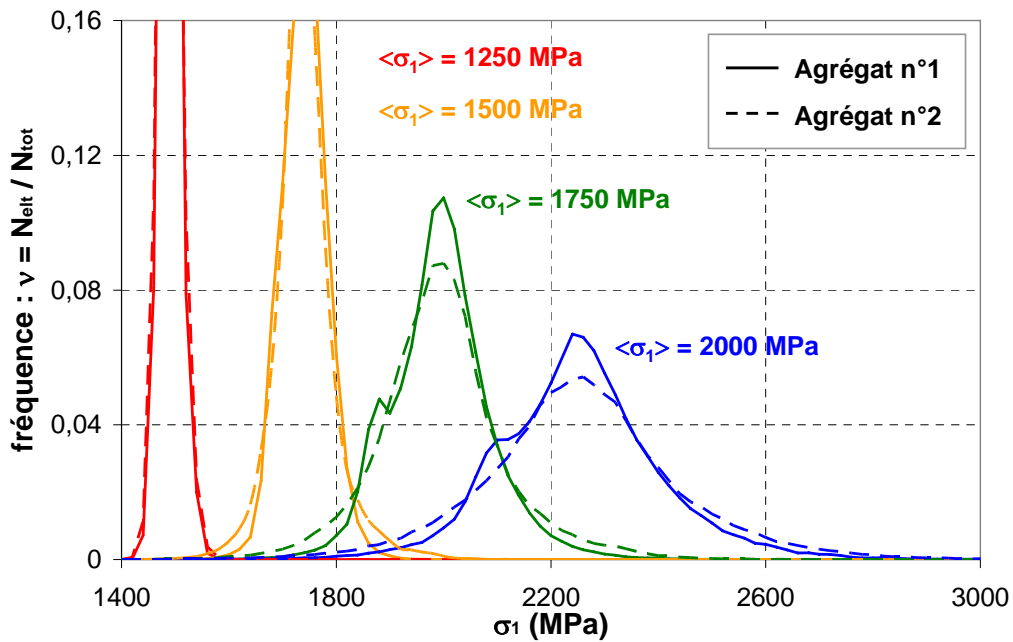


Fig. E.48 : Comparaison des histogrammes de  $\sigma_I$  pour  $\{T = -150^\circ\text{C}, \chi = 2,5\}$

La comparaison des agrégats n°1 et n°2 montre que, qualitativement, les queues de distributions de  $\sigma_I$  sont très proches, sauf dans le cas de figure  $T = -150^\circ\text{C} / \chi = 2,5$  et pour des états fortement déformés. Cette comparaison suggère que la taille d'agrégat de  $200 \times 200 \mu\text{m}^2$  est cristallographiquement représentative vis-à-vis des distributions de  $\sigma_I$ . On peut néanmoins nuancer cette affirmation par le fait que les simulations numériques n'ont pas été réalisées sur des agrégats 3D massifs mais dans des conditions de déformation plane.

b) Comparaison des distributions de  $\sigma_{\{100\}}$ 

Les cas de figure  $T = -150^\circ\text{C}$  et  $\chi = 1,5$  ou  $2,5$  sont les seuls permettant de réaliser une comparaison des distributions de contraintes de clivage entre les deux agrégats.

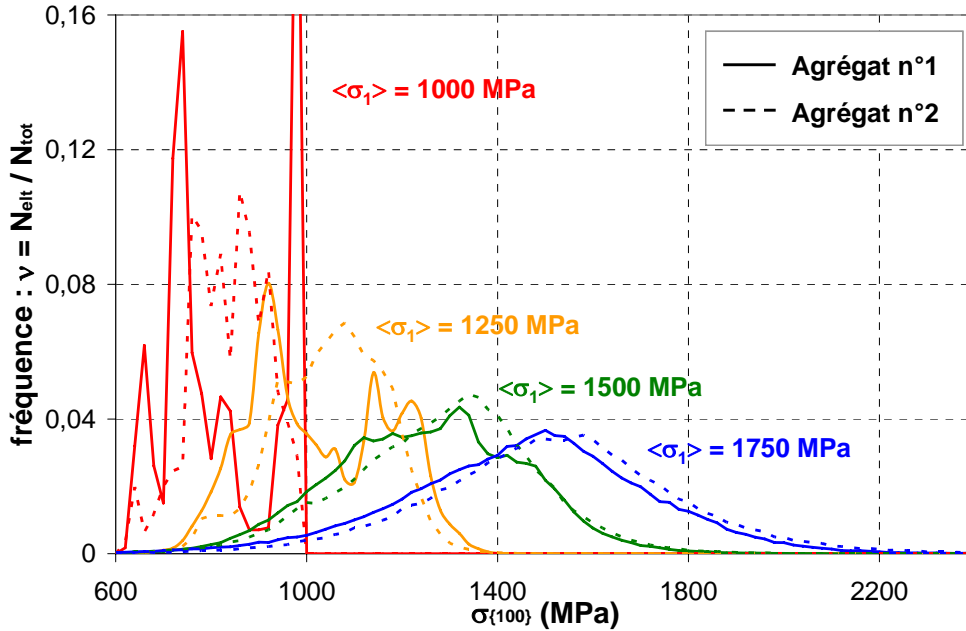


Fig. E.49 : Comparaison des histogrammes de  $\sigma_{\{100\}}$  pour  $\{T = -150^\circ\text{C}, \chi = 1,5\}$

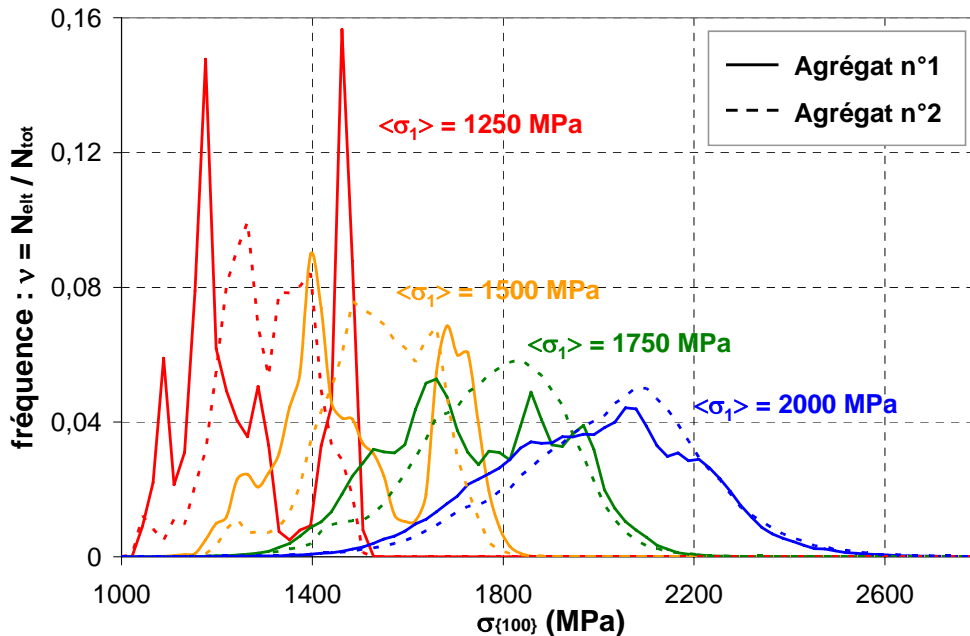


Fig. E.50 : Comparaison des histogrammes de  $\sigma_{\{100\}}$  pour  $\{T = -150^\circ\text{C}, \chi = 2,5\}$

Il apparaît que les histogrammes de  $\sigma_{\{100\}}$  sont très sensibles à la microstructure, ce qui résulte dans de fortes disparités entre les agrégats n°1 et n°2. Toutefois, ces disparités sont moins marquées lorsque le chargement mécanique s'accroît, tout spécialement en ce qui concerne les queues de distribution. Il serait intéressant de mener une étude quantitative des queues de

distributions de  $\sigma_{i100}$ , afin de savoir si la démarche adoptée pour les distributions de  $\sigma_I$  peut être étendue aux contraintes de clivage.

### E.3 Etude qualitative de l'évolution des hétérogénéités de contraintes principales maximales $\sigma_I$

Dans un premier temps les hétérogénéités de  $\sigma_I$  ont été étudiées à partir de l'écart relatif sur la variable  $\sigma_I$ , noté  $\delta(\sigma_I)$ , qui est défini par le quotient entre l'écart type  $\Delta(\sigma_I)$  et la contrainte moyenne  $\langle \sigma_I \rangle$  :

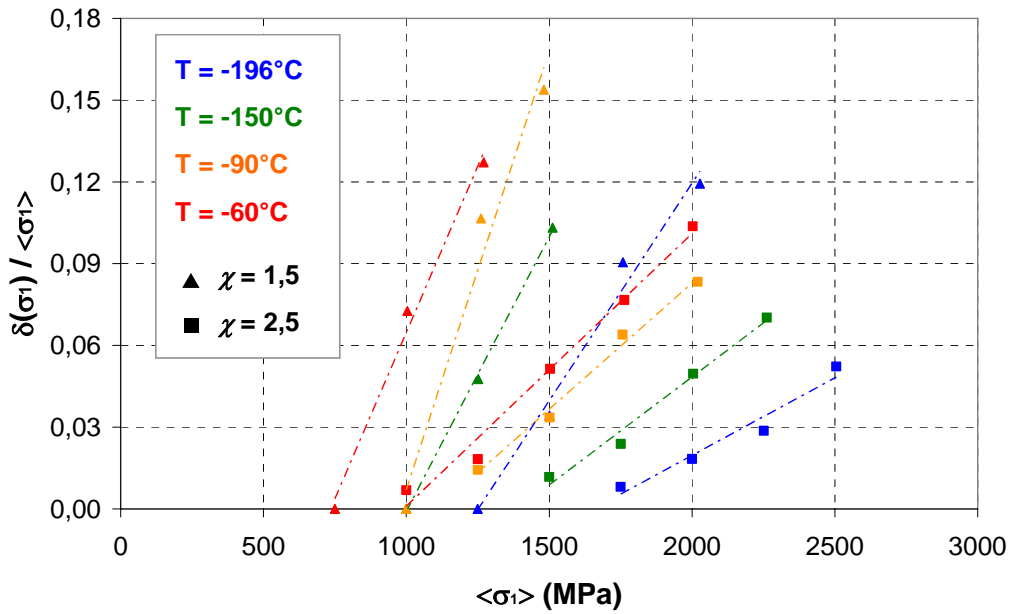
$$\delta(\sigma_I) = \frac{\Delta(\sigma_I)}{\langle \sigma_I \rangle} \quad (\text{E.7})$$

Il faut noter que la contrainte principale moyenne de  $\langle \sigma_I \rangle$  est recalculée et sauvegardée à chaque étape du calcul. Pour certains états fortement déformés, les valeurs de  $\langle \sigma_I \rangle$  peuvent être légèrement différentes des valeurs de contraintes normales  $\langle \sigma_n \rangle$  imposées aux bords de l'agrégat. La distorsion des surfaces initialement planes peut engendrer une différence entre les valeurs de  $\langle \sigma_n \rangle$  et  $\langle \sigma_I \rangle$ . Toutefois les tableaux et montrent que les valeurs recalculées de  $\langle \sigma_I \rangle$  demeurent très proches des valeurs de imposées  $\langle \sigma_n \rangle$ .

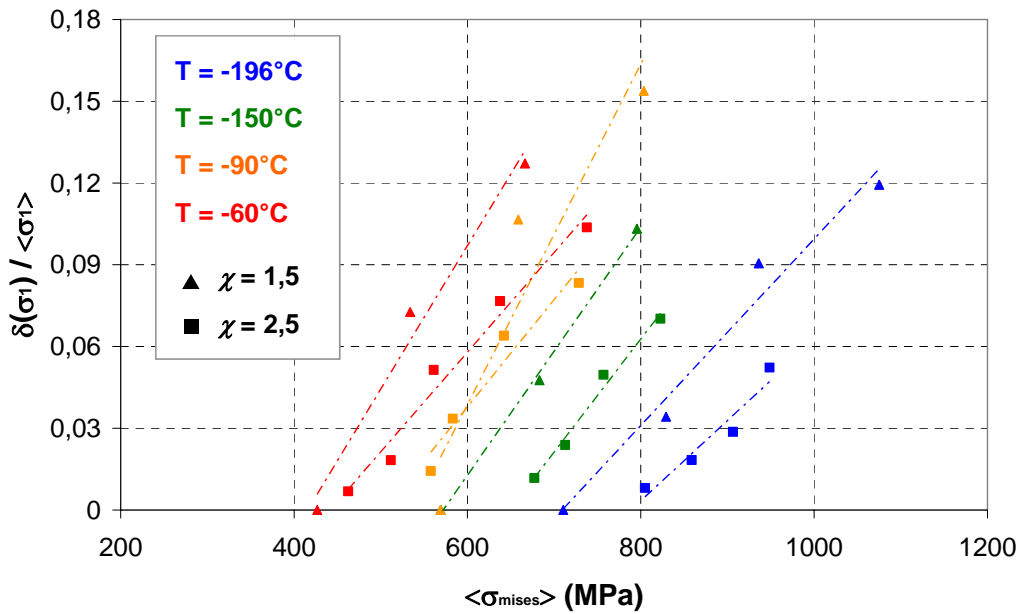
#### E.3.a Evolution de $\delta(\sigma_I)$ dans l'agrégat n°1

Température (°C)	$\chi = 1,5$				$\chi = 2,5$			
	$\langle \sigma_I \rangle$	$\langle \sigma_{mises} \rangle$	$\langle \varepsilon_{eq} \rangle$	$\delta(\sigma_I)$	$\langle \sigma_I \rangle$	$\langle \sigma_{mises} \rangle$	$\langle \varepsilon_{eq} \rangle$	$\delta(\sigma_I)$
-196	1250	711	0,004	0,000	1750	805	0,005	0,008
	1501	829	0,005	0,034	2000	859	0,006	0,018
	1758	936	0,021	0,090	2251	907	0,008	0,029
	2028	1075	0,101	0,119	2505	949	0,016	0,052
-150	1000	569	0,003	0,000	1500	677	0,004	0,012
	1251	683	0,005	0,048	1751	713	0,006	0,024
	1512	796	0,033	0,103	2004	757	0,012	0,050
					2262	823	0,038	0,070
-90	1000	569	0,003	0,000	1250	588	0,004	0,014
	1262	659	0,032	0,107	1501	583	0,006	0,034
	1481	804	0,209	0,154	1757	642	0,020	0,064
					2020	729	0,073	0,083
-60	750	427	0,002	0,000	1000	462	0,003	0,007
	1003	534	0,007	0,073	1250	512	0,004	0,018
	1270	666	0,072	0,127	1504	561	0,010	0,051
					1763	638	0,040	0,077
				2003	738	0,177	0,104	

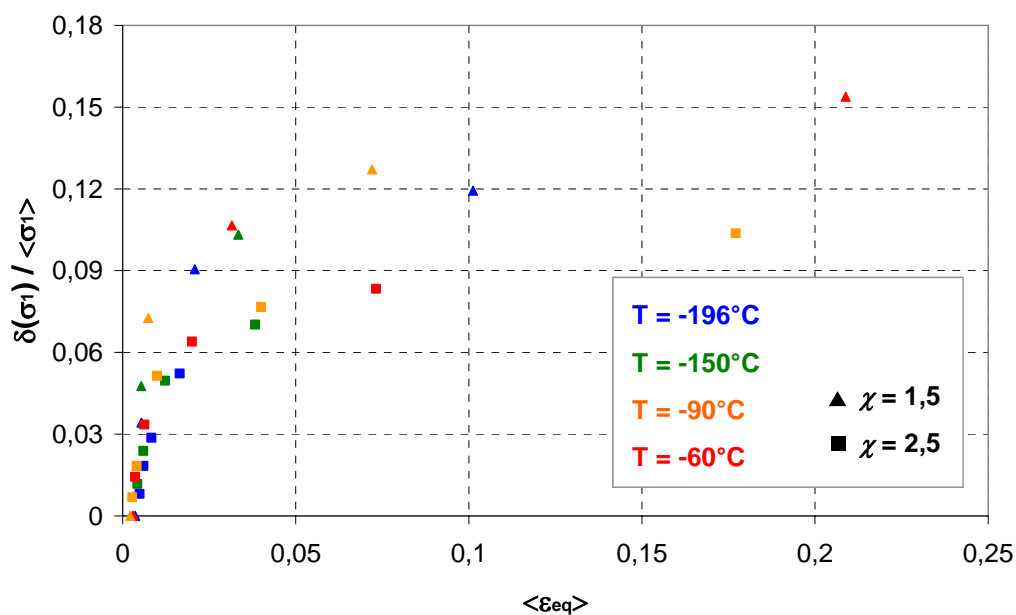
**Tableau E.1** : Valeurs de  $\langle \sigma_I \rangle$ ,  $\langle \sigma_{mises} \rangle$ ,  $\langle \varepsilon_{eq} \rangle$ , et d'écart type relatif  $\delta(\sigma_I)$  (agrégat n°1)



**Fig. E.51** : Evolution de l'écart type relatif  $\delta(\sigma_1)$  en fonction de la contrainte principale moyenne  $\langle \sigma_1 \rangle$  (agrégat n°1)



**Fig. E.52** : Evolution de l'écart type relatif  $\delta(\sigma_1)$  en fonction de la contrainte équivalente moyenne  $\langle \sigma_{mises} \rangle$  (agrégat n°1)



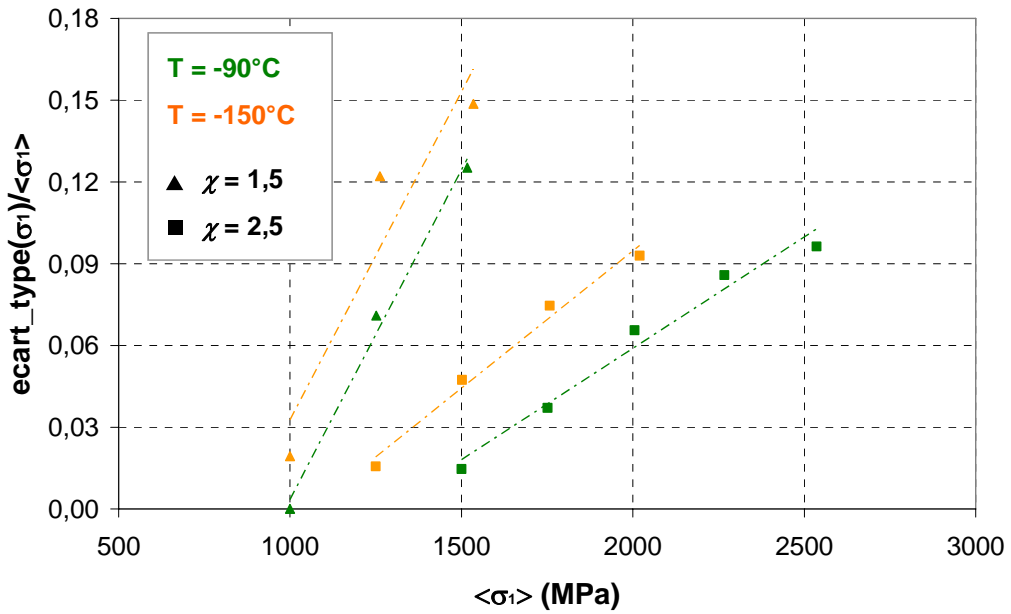
**Fig. E.53 :** Evolution de l'écart type relatif  $\delta(\sigma_I)$  en fonction de la déformation équivalente moyenne  $\langle \varepsilon_{eq} \rangle$  (agrégat n°1)

### E.3.b Evolution de $\delta(\sigma_I)$ dans l'agrégat n°2

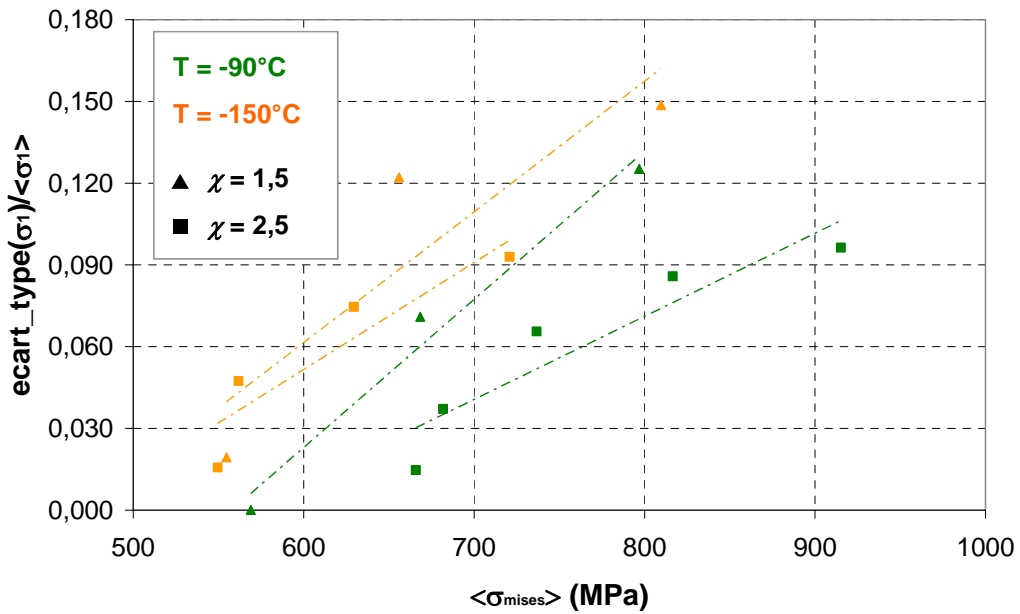
Température (°C)	$\chi = 1,5$				$\chi = 2,5$			
	$\langle \sigma_I \rangle$	$\langle \sigma_{mises} \rangle$	$\langle \varepsilon_{eq} \rangle$	$\delta(\sigma_I)$	$\langle \sigma_I \rangle$	$\langle \sigma_{mises} \rangle$	$\langle \varepsilon_{eq} \rangle$	$\delta(\sigma_I)$
-150	1000	569	0,003	0,000	1500	666	0,004	0,015
	1252	668	0,008	0,071	1751	682	0,007	0,037
	1517	797	0,048	0,125	2005	737	0,018	0,066
	1648	867	0,166	0,158	2267	817	0,053	0,086
					2536	915	0,124	0,096
-90	1000	555	0,003	0,019	1250	550	0,004	0,016
	1262	656	0,039	0,122	1502	562	0,006	0,047
	1535	810	0,162	0,149	1758	629	0,015	0,075
					2020	721	0,039	0,093

**Tableau E.2 :** Valeurs de  $\langle \sigma_I \rangle$ ,  $\langle \sigma_{mises} \rangle$ ,  $\langle \varepsilon_{eq} \rangle$ , et d'écart type relatif  $\delta(\sigma_I)$  (agrégat n°2)





**Fig. E.54 :** Evolution de l'écart type relatif  $\delta(\sigma_1)$  en fonction de la contrainte principale moyenne  $\langle \sigma_1 \rangle$  (agrégat n°2)



**Fig. E.55 :** Evolution de l'écart type relatif  $\delta(\sigma_1)$  en fonction de la contrainte équivalente moyenne  $\langle \sigma_{mises} \rangle$  (agrégat n°2)

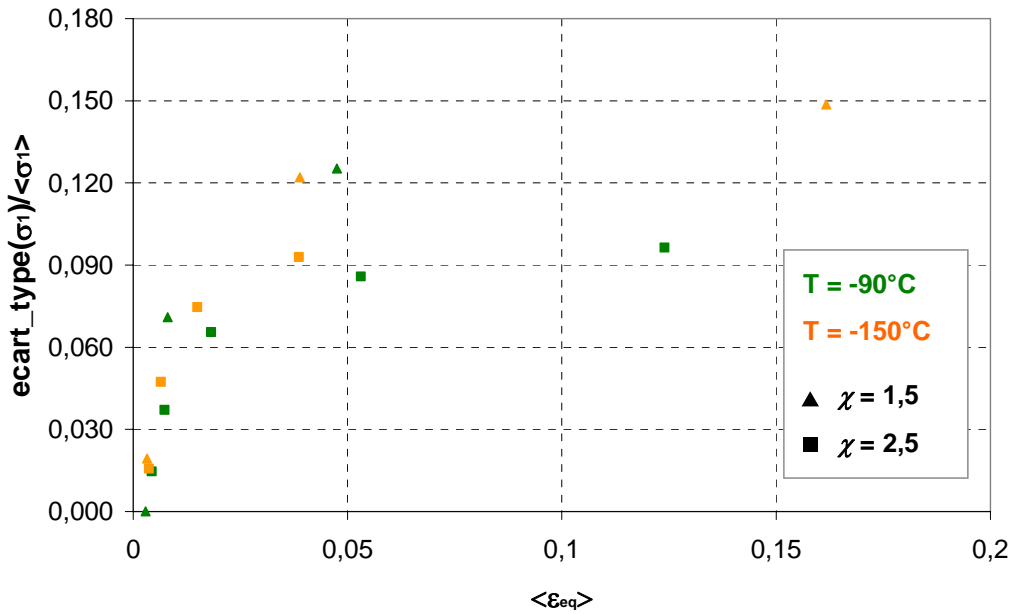


Fig. E.56 : Evolution de l'écart type relatif  $\delta(\sigma_1)$  en fonction de la déformation équivalente moyenne  $\langle \varepsilon_{eq} \rangle$  (agrégat n°2)

## E.4 Etude quantitative des distributions de contraintes principales $\sigma_1$ dans la microstructure

### E.4.a Choix des fonctions de distributions étudiées

Dans le cadre de la prévision de la rupture, il semble naturel de s'intéresser aux valeurs de contraintes les plus élevées dans l'agrégat. Plutôt que de décrire la distribution de tout le spectre de valeurs de  $\sigma_1$ , on s'intéresse uniquement aux valeurs extrêmes.

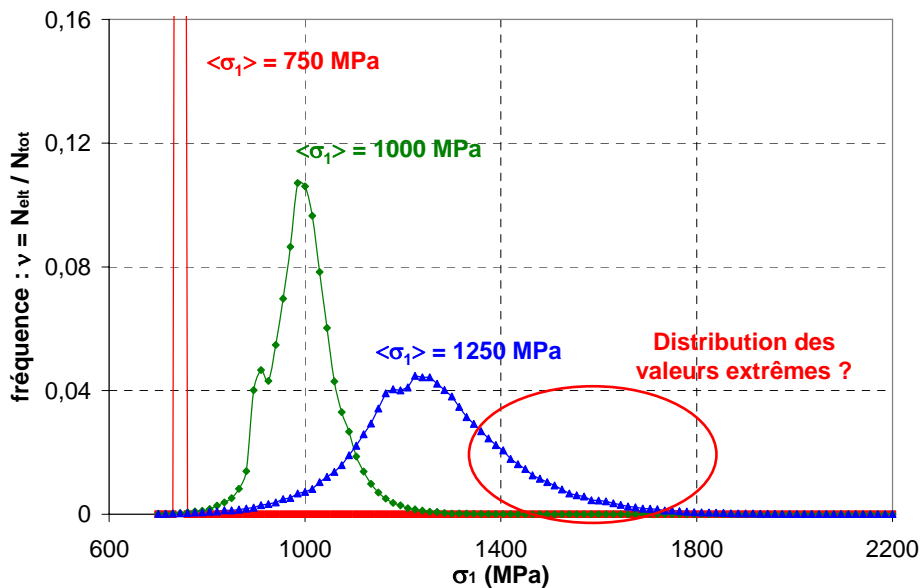


Fig. E.57 : Intérêt de l'étude des queues de distributions dans le cadre de la modélisation de la rupture fragile par une approche locale

Plusieurs fonctions de distributions mathématiques sont couramment utilisées pour représenter la distribution des valeurs extrêmes d'une population. Nous avons retenu deux fonctions citées dans [CAR98], les fonctions de Gumbel de première et seconde espèce. D'après la distribution de Gumbel de première espèce, la probabilité  $P(\sigma_I < \sigma)$  que la contrainte principale  $\sigma_I$  soit inférieure à une valeur  $\sigma$  vaut :

$$P(\sigma_I < \sigma) = \exp\left(-\exp\left(-\frac{\sigma - A}{B}\right)\right) \quad (\text{E.8})$$

où  $\sigma$  désigne la variable aléatoire,  $A$  et  $B$  étant deux paramètres à identifier.  $A$  et  $B$  sont reliés à la contrainte moyenne  $\langle \sigma_I \rangle$  par la relation :

$$\langle \sigma_I \rangle = A - B \Gamma'(1) \quad (\text{E.9})$$

La distribution de Gumbel de seconde espèce correspond à une expression de  $P(\sigma_I < \sigma)$  légèrement différente, faisant intervenir deux paramètres  $A$  et  $m$  :

$$P(\sigma_I < \sigma) = \exp\left(-\left(\frac{A}{\sigma}\right)^m\right) \quad (\text{E.10})$$

Les paramètres des deux fonctions de distribution sont identifiés sur les hétérogénéités de  $\sigma_I$  dans les deux agrégats étudiés. L'objectif est de déterminer si une de ces fonctions de distributions permet de représenter les hétérogénéités de  $\sigma_I$ , et éventuellement de déterminer laquelle est la plus pertinente. Nous testons également une fonction de distribution de type Weibull afin de juger de la pertinence de l'utilisation de fonctions de distribution de valeurs extrêmes :

$$P(\sigma_I < \sigma) = 1 - \exp\left(-\left(\frac{\sigma}{\sigma_u}\right)^m\right) \quad (\text{E.11})$$

#### E.4.b Identification d'une fonction de type Gumbel de première espèce à partir des hétérogénéités de $\sigma_I$ dans l'agrégat polycristallin

En toute rigueur, la fonction de Gumbel de première espèce ne comporte qu'un seul paramètre indépendant à identifier,  $A$  et  $B$  étant reliés directement à la contrainte principale moyenne  $\langle \sigma_I \rangle$ . Nous avons toutefois identifié  $A$  et  $B$  indépendamment, et ensuite testé la validité de l'équation (E.9). En utilisant l'équation (E.8), on peut montrer que :

$$\text{Ln}[-\text{Ln}[P(\sigma_I < \sigma)]] = -\frac{\sigma - A}{B} \quad (\text{E.12})$$

Par conséquent, en exprimant le terme  $\text{Ln}(-\text{Ln}(P(\sigma_I < \sigma)))$  en fonction de  $s$ , on devrait obtenir une droite de pente  $-1/B$  et d'ordonnée à l'origine  $A/B$ , ce qui permet d'identifier  $A$  et  $B$ . Cette démarche a été d'abord appliquée à tous les calculs numériques réalisés sur l'agrégat n°1 (8 calculs EF en tout).

a) Cas de l'agrégat n°1

On donne les courbes  $\text{Ln}(-\text{Ln}(P(\sigma_1 < \sigma))) = f(\sigma)$  pour l'ensemble des valeurs de température ( $T = -60^\circ\text{C}$ ,  $-90^\circ\text{C}$ ,  $-150^\circ\text{C}$  et  $-196^\circ\text{C}$ ), ainsi que pour les deux niveaux de triaxialité ( $\chi = 1,5$  et  $2,5$ ). La fonction de Gumbel n'est identifiée que sur les queues de distribution, plus précisément pour  $P(\sigma_1 < \sigma) > 0,66$ . Le tableau récapitulatif des valeurs de  $A$  et  $B$  identifiées par régression linéaire d'après ces courbes est fourni à la fin.

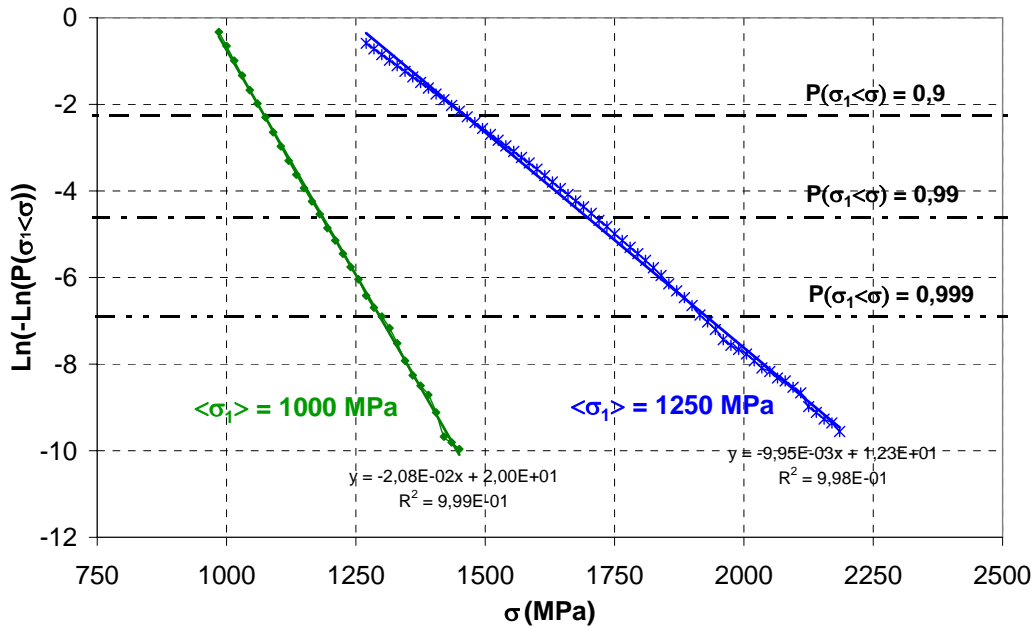


Fig. E.58 : Identification des paramètres  $A$  et  $B$  de la fonction de Gumbel de première espèce sur les résultats de l'agrégat n°1  $\{T = -60^\circ\text{C}, \chi = 1,5\}$

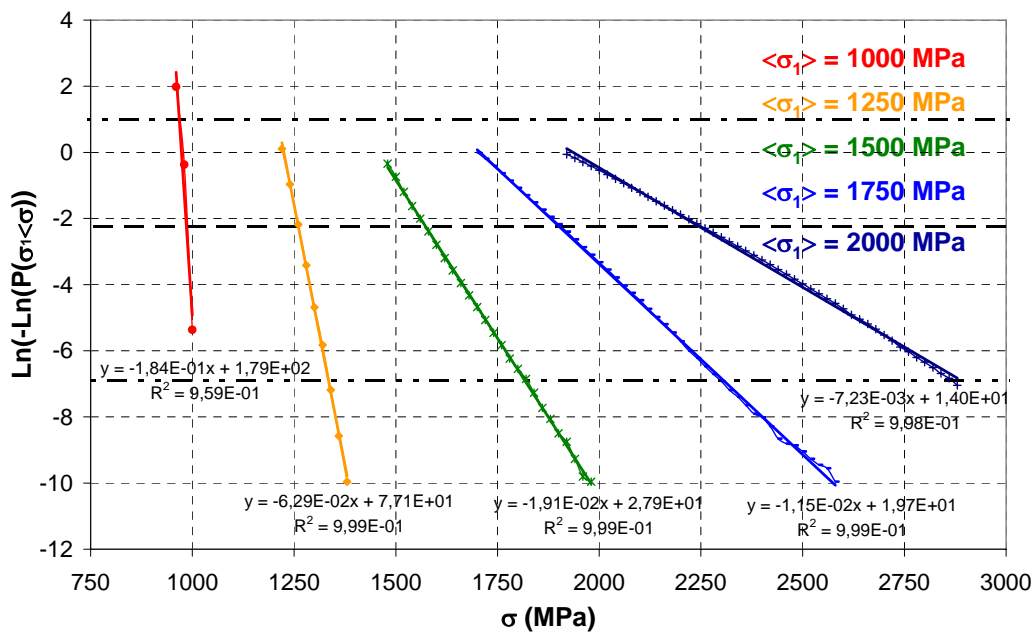
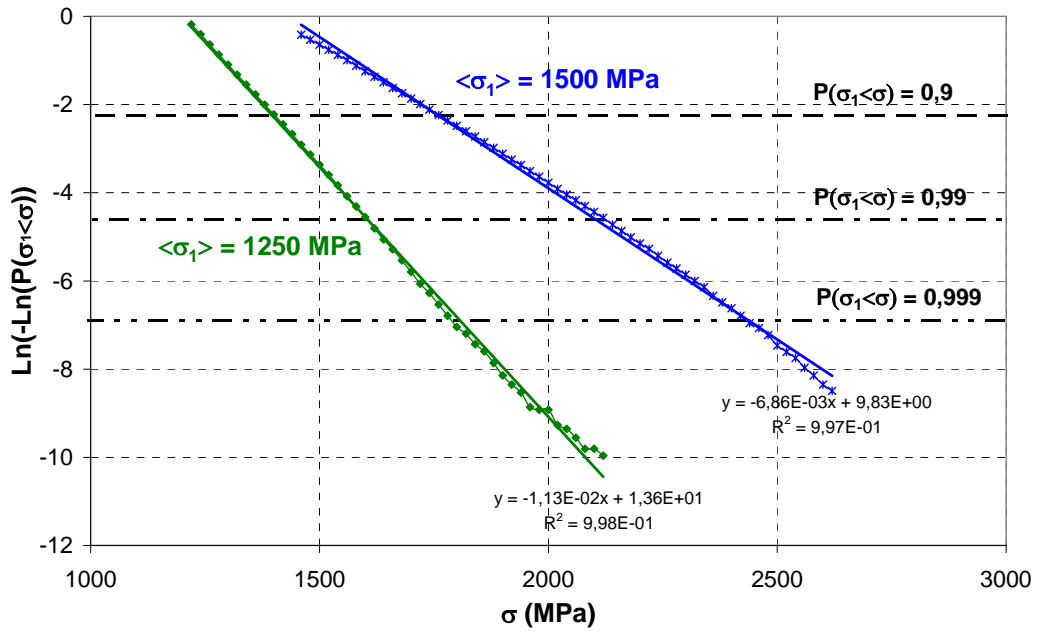
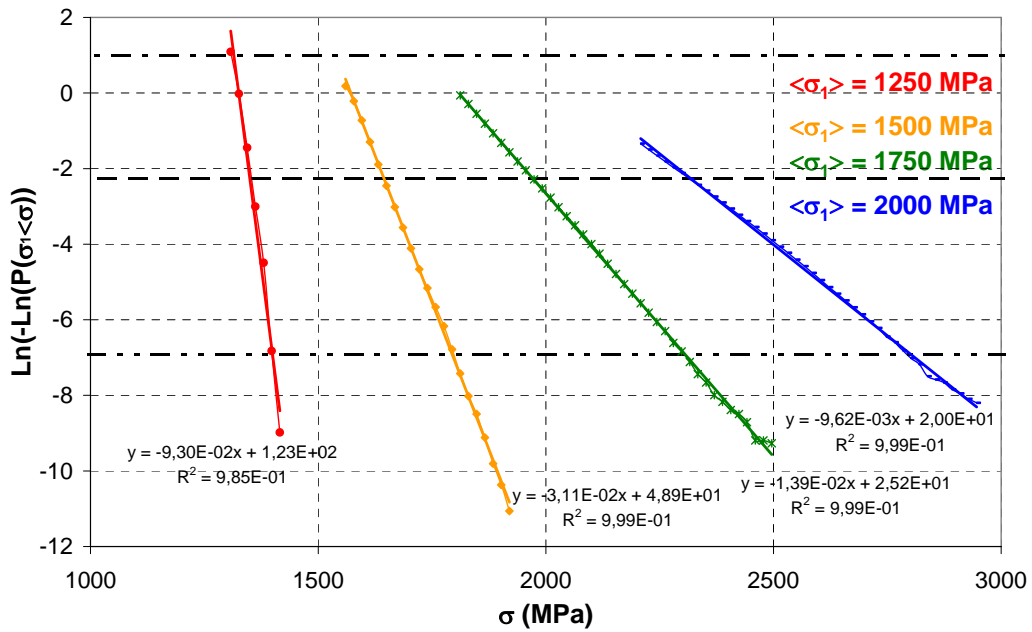


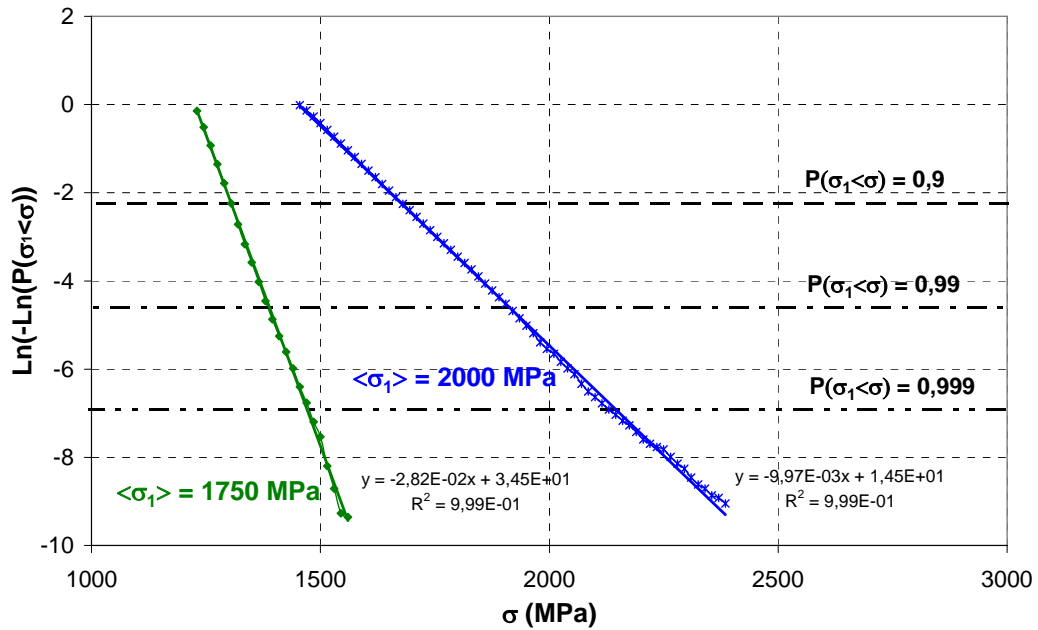
Fig. E.59 : Identification des paramètres  $A$  et  $B$  de la fonction de Gumbel de première espèce sur les résultats de l'agrégat n°1  $\{T = -60^\circ\text{C}, \chi = 2,5\}$



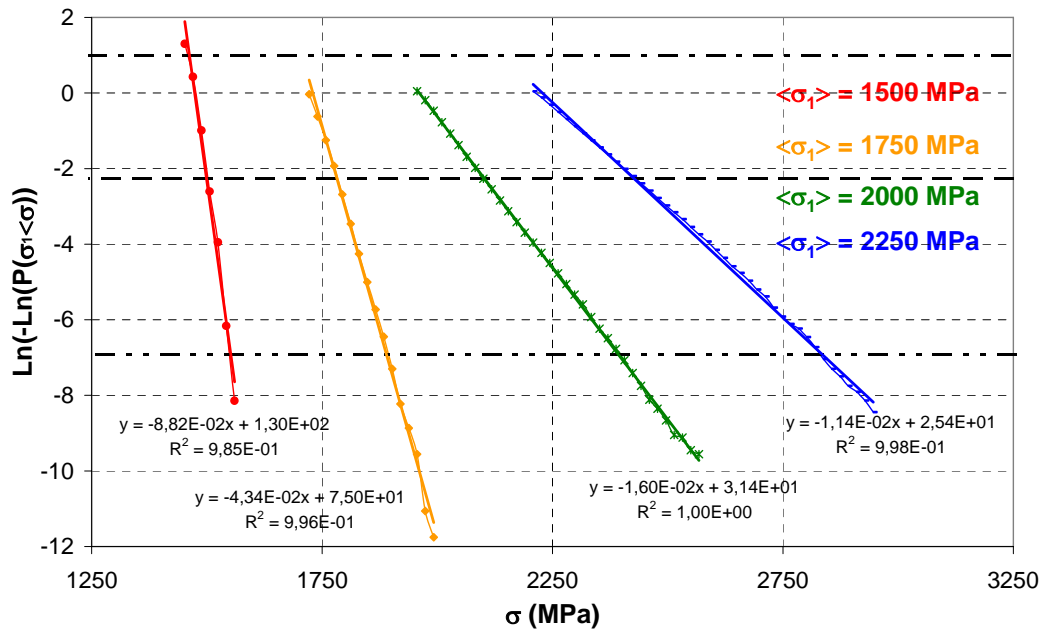
**Fig. E.60 :** Identification des paramètres  $A$  et  $B$  de la fonction de Gumbel de première espèce sur les résultats de l'agrégat n°1  $\{T = -90^\circ\text{C}, \chi = 1,5\}$



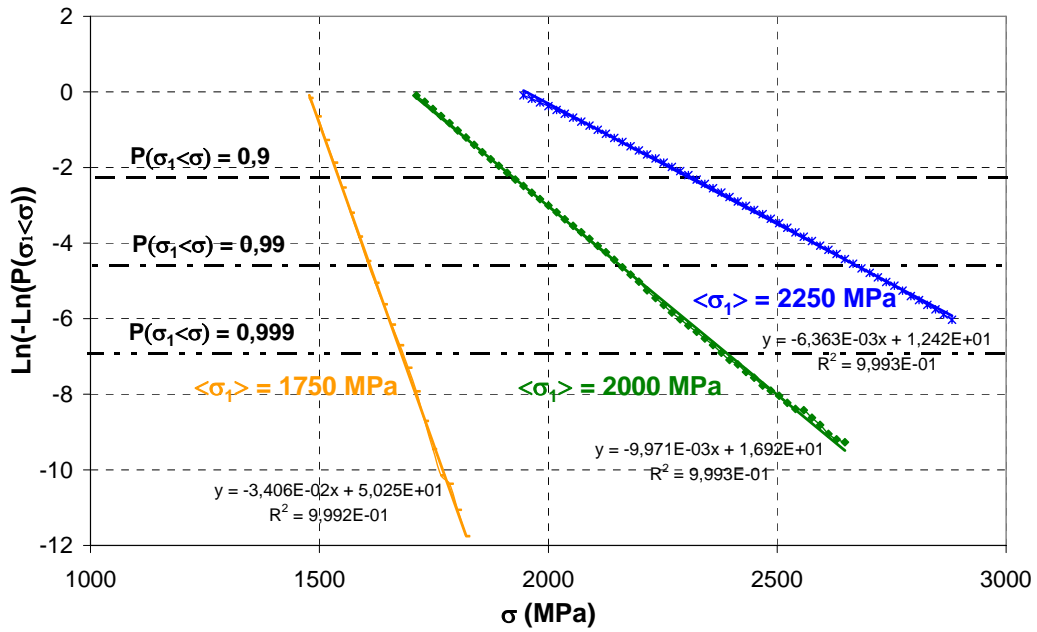
**Fig. E.61 :** Identification des paramètres  $A$  et  $B$  de la fonction de Gumbel de première espèce sur les résultats de l'agrégat n°1  $\{T = -90^\circ\text{C}, \chi = 2,5\}$



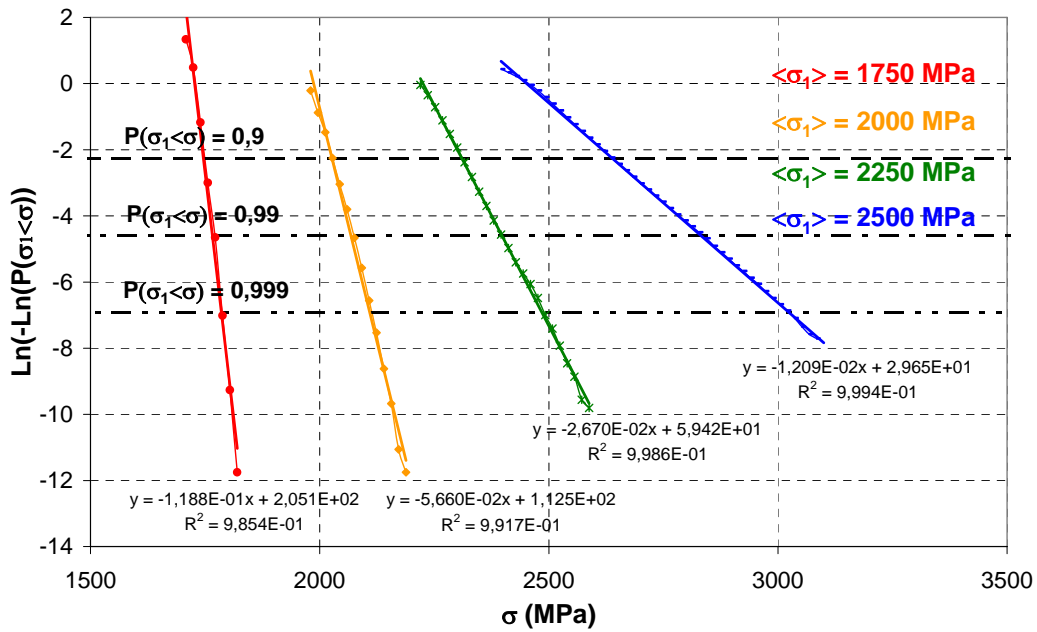
**Fig. E.62 :** Identification des paramètres  $A$  et  $B$  de la fonction de Gumbel de première espèce sur les résultats de l'agrégat n°1  $\{T = -150^\circ\text{C}, \chi = 1,5\}$



**Fig. E.63 :** Identification des paramètres  $A$  et  $B$  de la fonction de Gumbel de première espèce sur les résultats de l'agrégat n°1  $\{T = -150^\circ\text{C}, \chi = 2,5\}$



**Fig. E.64 :** Identification des paramètres  $A$  et  $B$  de la fonction de Gumbel de première espèce sur les résultats de l'agrégat n°1 ( $T = -196^\circ\text{C}$ ,  $\chi = 1,5$ )



**Fig. E.65 :** Identification des paramètres  $A$  et  $B$  de la fonction de Gumbel de première espèce sur les résultats de l'agrégat n°1 ( $T = -196^\circ\text{C}$ ,  $\chi = 2,5$ )

Température (°C)	$\chi = 1,5$			$\chi = 2,5$		
	$\langle \sigma_1 \rangle$	A	B	$\langle \sigma_1 \rangle$	A	B
-196	1250			1750	1726	8,4
	1501	1475	29,4	2000	1988	17,7
	1758	1697	100,3	2251	2226	37,5
	2028	1952	157,2	2505	2452	82,7
-150	1000			1500	1474	11,3
	1251	1223	35,5	1751	1728	23,0
	1512	1454	100,3	2004	1963	62,5
				2262	2228	87,7
-90	1000			1250	1323	10,8
	1262	1204	88,5	1501	1572	32,2
	1481	1433	145,8	1757	1813	71,9
				2020	2079	104,0
-60	750			1000	971	5,4
	1003	964	48,1	1250	1225	15,9
	1270	1235	100,5	1504	1457	52,2
				1763	1707	86,7
			2003	1930	138,3	

Tableau E.3 : Valeurs de  $A$  et  $B$  identifiées d'après les simulations réalisées sur l'agrégat n°1

b) Cas de l'agrégat n°2

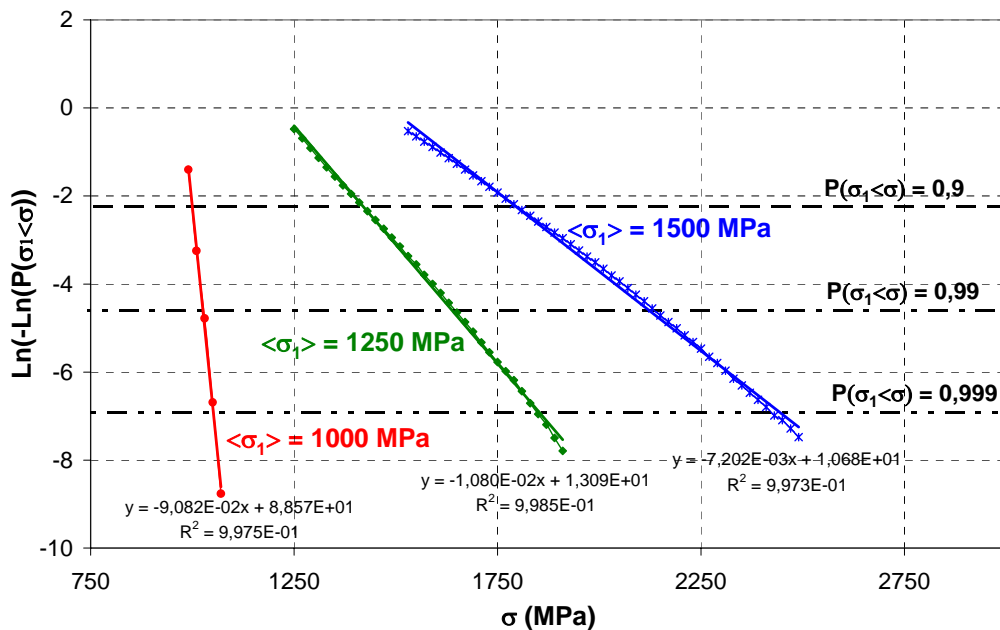
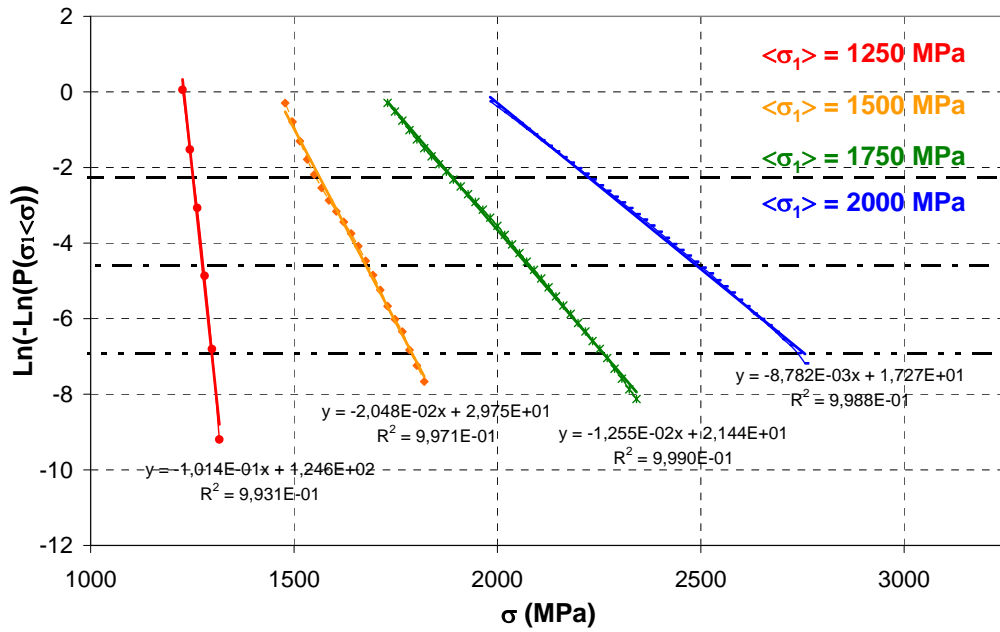
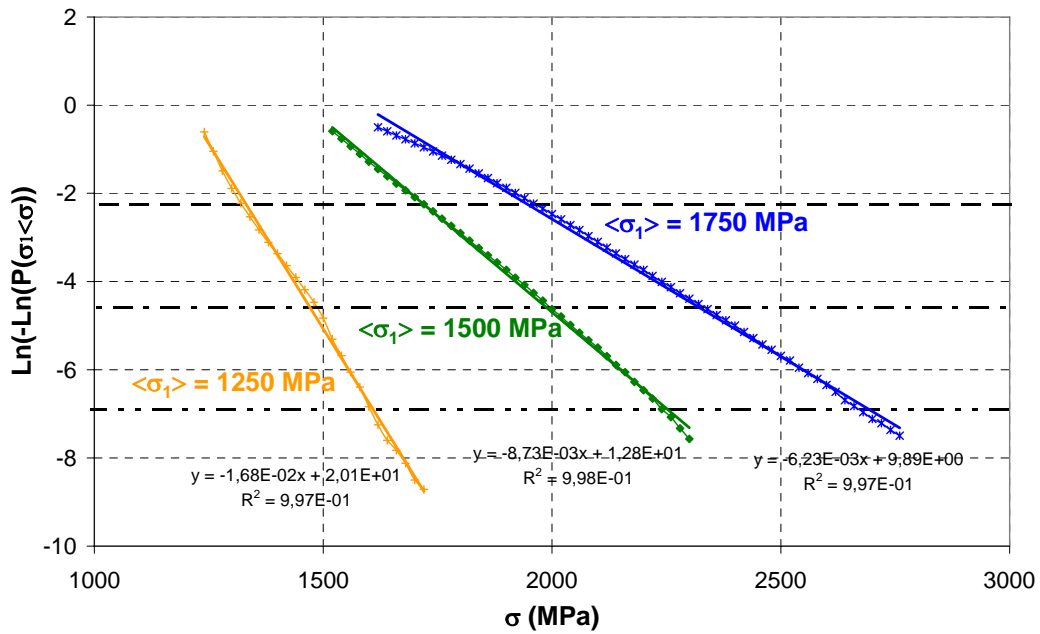


Fig. E.66 : Identification des paramètres  $A$  et  $B$  de la fonction de Gumbel de première espèce sur les résultats de l'agrégat n°2  $\{T = -196^\circ\text{C}, \chi = 2,5\}$





**Fig. E.67 :** Identification des paramètres  $A$  et  $B$  de la fonction de Gumbel de première espèce sur les résultats de l'agrégat n°2  $\{T = -196^{\circ}\text{C}, \chi = 2,5\}$



**Fig. E.68 :** Identification des paramètres  $A$  et  $B$  de la fonction de Gumbel de première espèce sur les résultats de l'agrégat n°2  $\{T = -196^{\circ}\text{C}, \chi = 2,5\}$

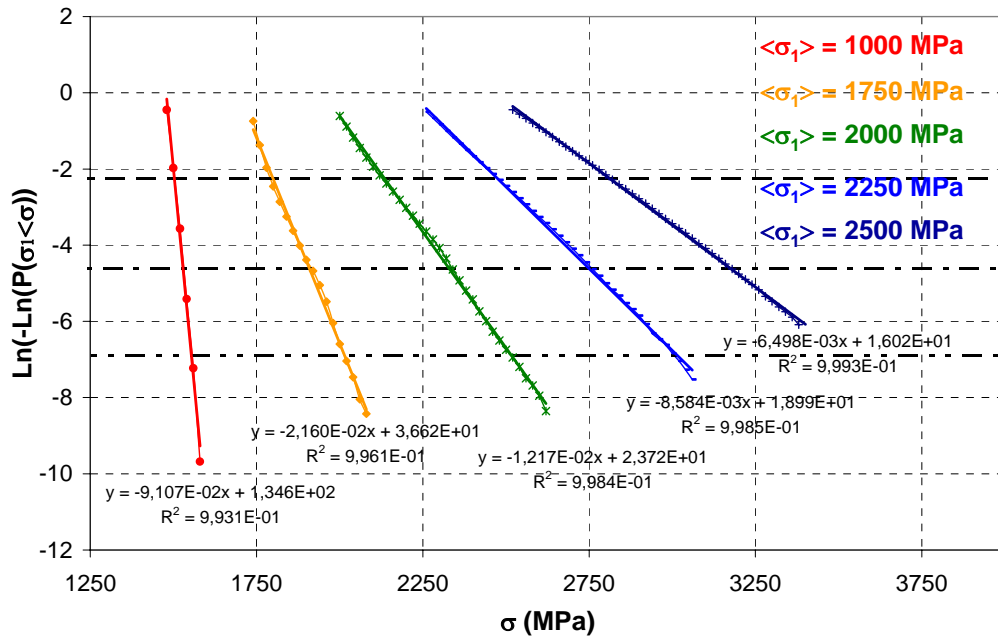


Fig. E.69 : Identification des paramètres A et B de la fonction de Gumbel de première espèce sur les résultats de l'agrégat n°2 { T = -196°C , χ = 2,5 }

Température (°C)	χ = 1,5			χ = 2,5		
	<σ₁>	A	B	<σ₁>	A	B
-150	1000			1500	1478	11
	1252	1197	60	1751	1695	46
	1517	1462	115	2005	1949	82
	1648	1586	160	2267	2212	117
				2536	2465	154
-90	1000	975	11	1250	1229	10
	1262	1212	93	1502	1453	49
	1535	1483	139	1758	1708	80
				2020	1967	114

Tableau E.4 : Valeurs de B identifiées d'après les simulations réalisées sur l'agrégat n°2

#### E.4.c Paramétrisation de la constante A associée à la distribution de Gumbel de première espèce en fonction de <σ₁>

Les paramètres A et B étant identifiés indépendamment, nous avons vérifié la validité de la relation liant les deux paramètres dans l'expression de la fonction de Gumbel :

$$\langle \sigma_1 \rangle = A - B \Gamma'(1) \quad (E.13)$$

L'expression  $A - B \Gamma'(1)$  a été tracée en fonction de <σ₁> pour chacune des valeurs de <σ₁>, T et χ et pour chacun des deux agrégats étudiés.

## a) Cas de l'agrégat n°1

La figure (E.71) montre que la relation (E.13) est bien vérifiée pour l'agrégat n°1. On remarque toutefois que quelques points s'écartent de la droite de régression linéaire, notamment pour les tous les états de chargement correspondant à  $T = -150^{\circ}\text{C}$  et  $\chi = 2,5$ .

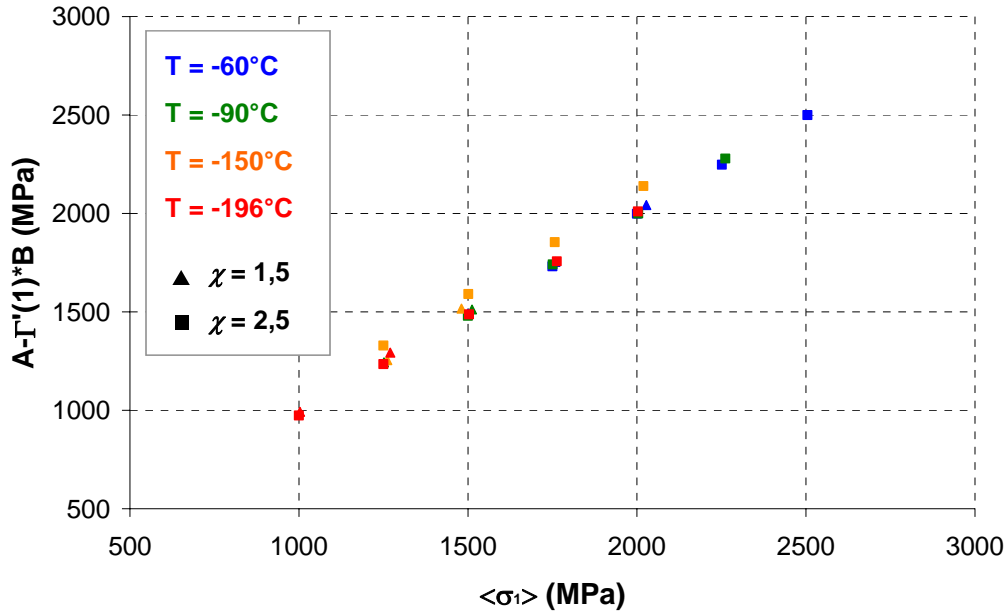


Fig. E.70 : Représentation de la grandeur  $A - B \Gamma'(l)$  en fonction de  $\langle \sigma_l \rangle$  (agrégat n°1)

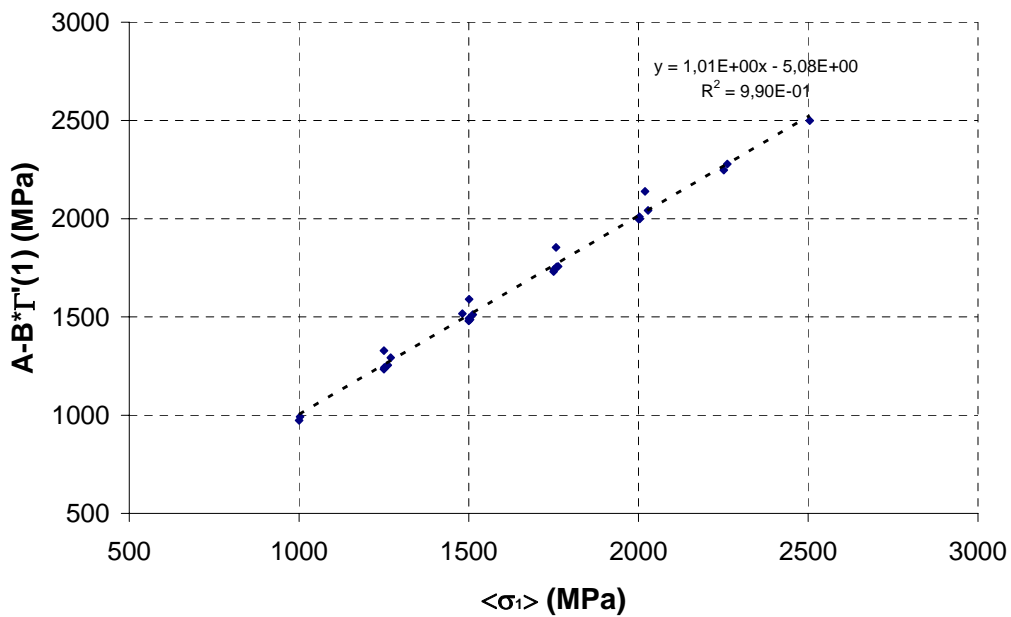


Fig. E.71 : Vérification de la relation entre  $A$  et  $\langle \sigma_l \rangle$  :  $A - B \Gamma'(l) = \langle \sigma_l \rangle$  (agrégat n°1)

## b) Cas de l'agrégat n°2

La relation (E.13) est également valable pour l'agrégat n°2 (figure E.73). La simulation à  $T = -150^{\circ}\text{C}$  /  $\chi = 2,5$  ne pose plus de problème particulier. Cependant, la régression linéaire est effectuée à partir de 4 simulations numériques (au lieu de 8 pour l'agrégat n°1).

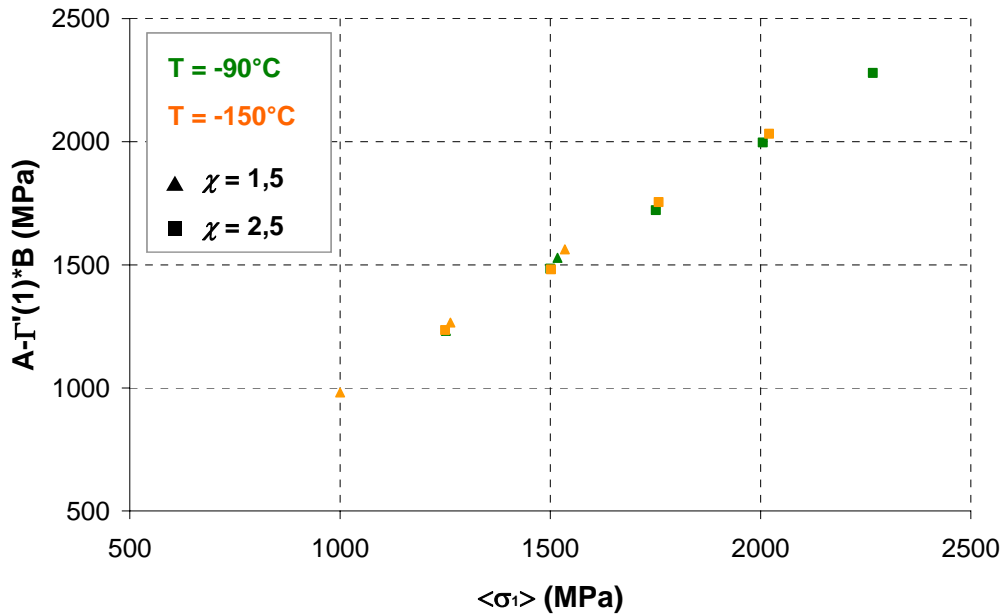


Fig. E.72 : Représentation de la grandeur  $A - B \Gamma'(l)$  en fonction de  $\langle \sigma_I \rangle$  (agrégat n°2)

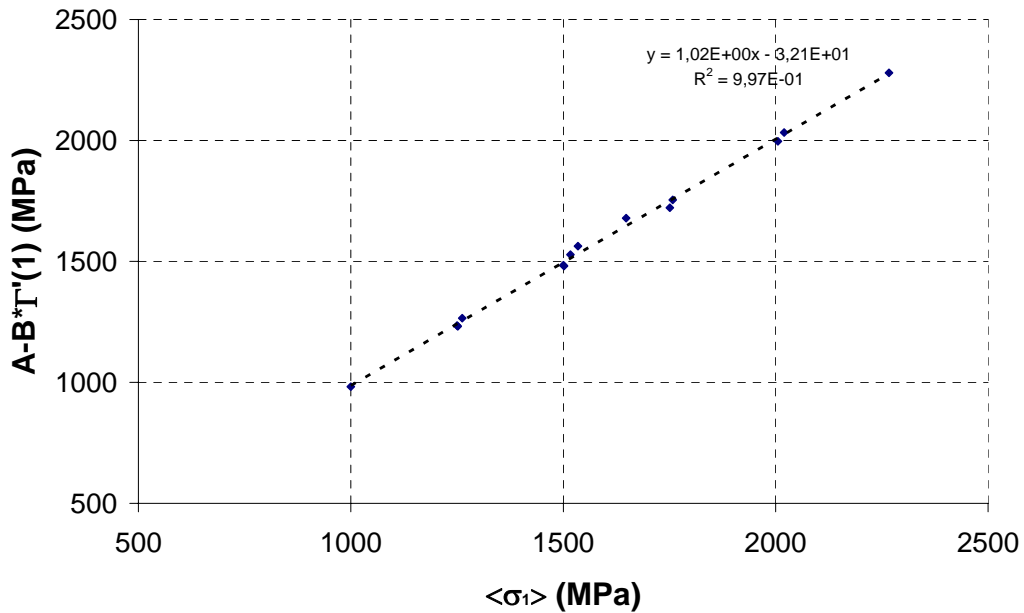


Fig. E.73 : Vérification de la relation entre  $A$  et  $\langle \sigma_I \rangle$  :  $A - B \Gamma'(l) = \langle \sigma_I \rangle$  (agrégat n°2)

#### E.4.d Paramétrisation de la constante $B$ associée à la distribution de Gumbel de première espèce en fonction de $\langle \sigma_I \rangle$ , $\langle \varepsilon_{eq} \rangle$ et $\langle \sigma_{mises} \rangle$

##### a) Evolution de $B$ en fonction de $\langle \sigma_I \rangle$

Les courbes décrivant l'évolution de  $B$  en fonction de la contrainte principale moyenne  $\langle \sigma_I \rangle$  sont données ci-après.

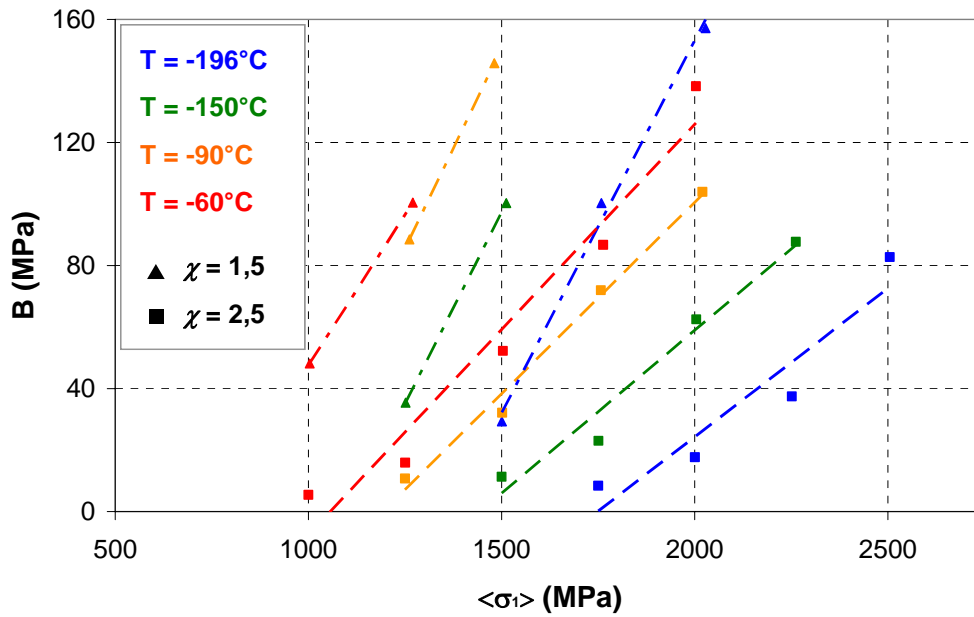


Fig. E.74 : Evolution de  $B$  en fonction de  $\langle \sigma_I \rangle$  (agrégat n°1)

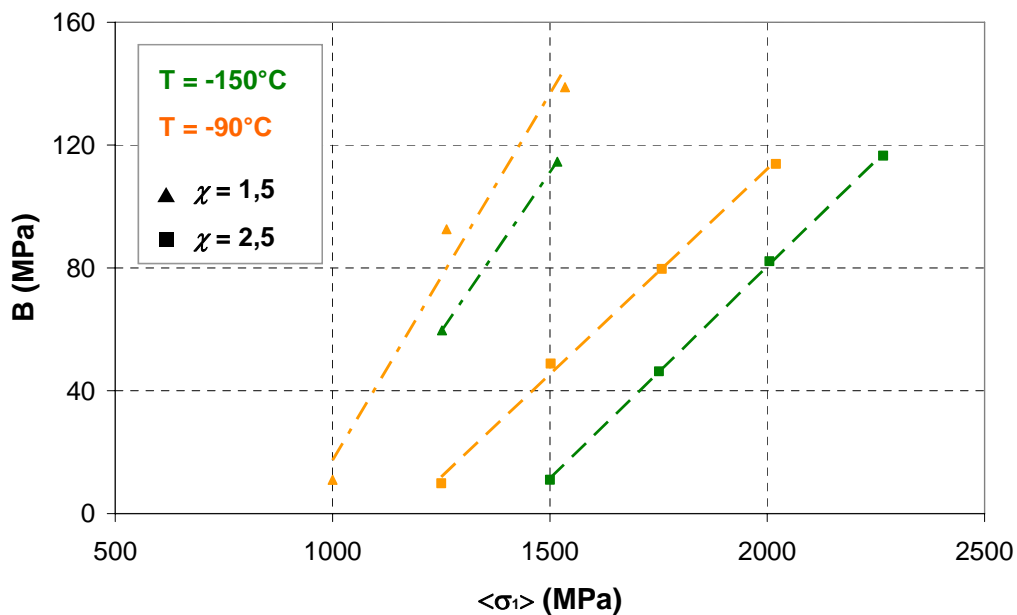


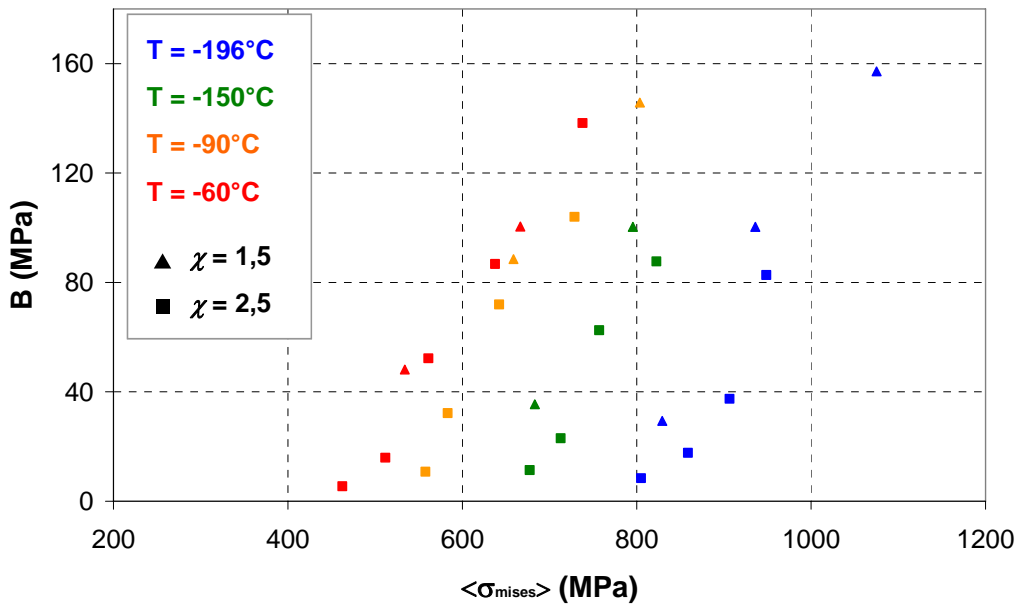
Fig. E.75 : Evolution de  $B$  en fonction de  $\langle \sigma_I \rangle$  (agrégat n°2)

Il ne semble pas possible de corrélérer ces deux paramètres : tout au plus peut on suggérer une relation linéaire entre  $B$  et  $\langle \sigma_I \rangle$ , mais dont la pente dépendrait du niveau de triaxialité  $\chi$ .  $\langle \sigma_I \rangle$  ne semble pas être le paramètre le plus pertinent pour décrire l'évolution de  $B$ . Or, deux valeurs de  $\chi$  sont étudiées, ce qui ne permet pas d'identifier l'influence de ce paramètre de manière quantitative.

### b) Paramétrisation de $B$ en fonction de $\langle \sigma_{mises} \rangle$

Le paramètre  $B$  est directement relié au niveau d'hétérogénéité de  $\sigma_I$  dans l'agrégat. Or l'évolution des hétérogénéités doit en principe être corrélée avec le niveau de déformation moyen. En conséquence, nous avons également tenté de corrélérer la contrainte équivalente moyenne dans l'agrégat  $\langle \sigma_{mises} \rangle$  avec  $B$ .

- Agrégat n°1 :



**Fig. E.76 :** Evolution de  $B$  en fonction de  $\langle \sigma_{mises} \rangle$  (agrégat n°1)

La figure E.77 montre que, pour une température donnée les points s'alignent sur une même droite, et ce quel que soit le niveau de triaxialité. De plus, le coefficient directeur de la droite est assez peu sensible à la température. Toutefois, Il apparaît qu'une variation de  $T$  a pour effet de décaler l'ordonnée à l'origine de cette droite.

Contrairement à  $\langle \sigma_I \rangle$ ,  $\langle \sigma_{mises} \rangle$  semble être un bon indicateur pour caractériser l'évolution du paramètre  $B$ . On propose la relation suivante :

$$B(\sigma_{mises}, T) = \alpha \langle \sigma_{mises} \rangle + \beta(T) \quad (\text{E.14})$$

$\alpha$  et  $\beta$  sont deux paramètres à identifier.  $\alpha$  n'est pas rigoureusement indépendant de  $T$ , mais il peut être fixé en première approximation. Quand à  $\beta$ , il dépend fortement de  $T$ . Ces deux

paramètres sont d'abord identifiés sur les résultats numériques de l'agrégat n°1 (figure E.77 et tableau E.5), puis sur ceux de l'agrégat n°2 (figures E.78 et tableau E.6).

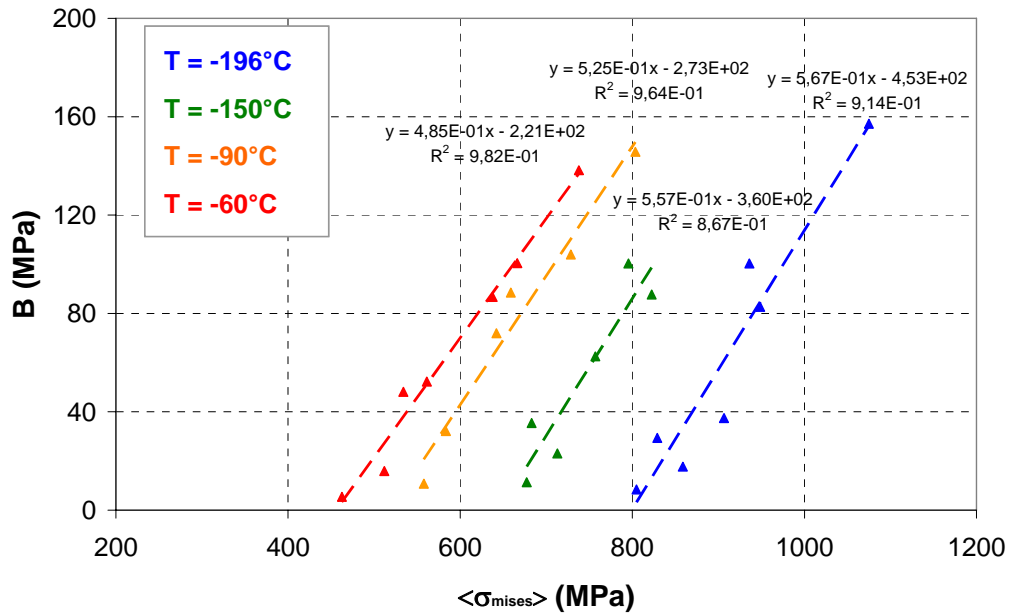


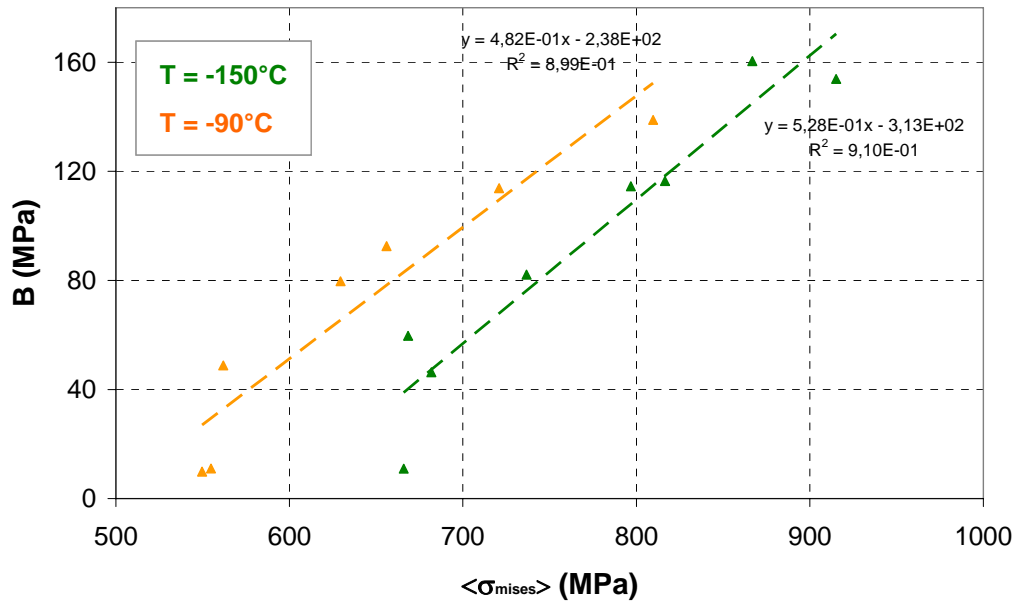
Fig. E.77 : Identification d'une relation de type  $B = \alpha \langle \sigma_{mises} \rangle + \beta$  (agrégat n°1)

$T (K)$	$\alpha$	$\beta$	$R^2$
-196	0,567	-453	0,98
-150	0,557	-360	0,87
-90	0,525	-273	0,96
-60	0,485	-221	0,98

Tableau E.5 : Identification des paramètres  $\alpha$  et  $\beta$  pour l'agrégat n°1

- Agrégat n°2 :

La même démarche a été entreprise sur l'agrégat n°2.



**Fig. E.78 :** Evolution de  $B$  en fonction de  $\langle \sigma_{mises} \rangle$  (agrégat n°2)

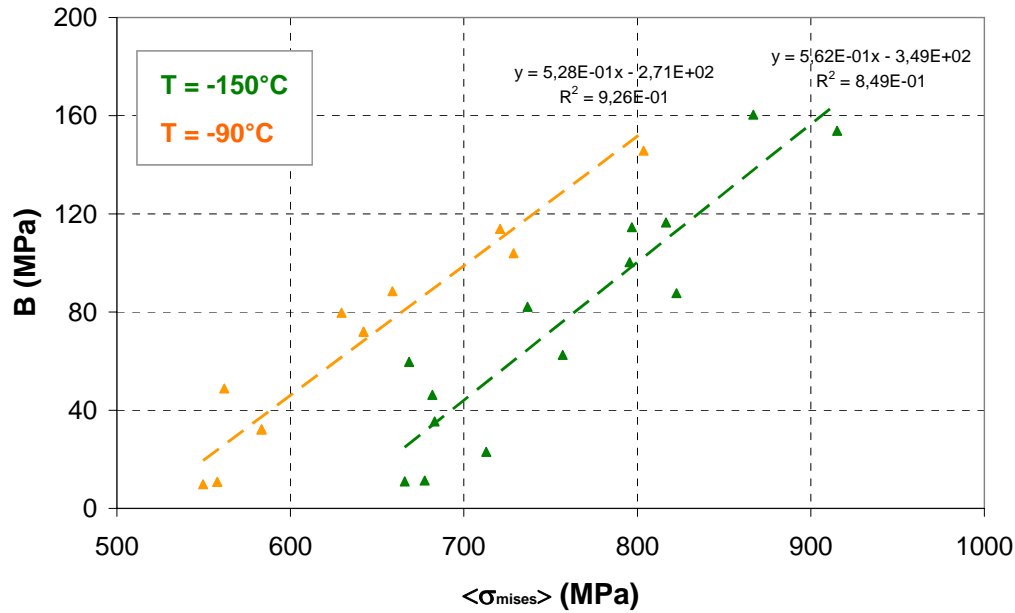
$T$ (K)	$\alpha$	$\beta$	$R^2$
-150	0,528	-313	0,91
-90	0,482	-238	0,90

**Tableau E.6 :** Identification des paramètres  $\alpha$  et  $\beta$  pour l'agrégat n°1

Les valeurs de  $\alpha$  et  $\beta$  identifiées à  $-150^\circ\text{C}$  et  $-90^\circ\text{C}$  sur le second agrégat sont légèrement différentes de celles identifiées sur le premier, et on peut remarquer que la corrélation est moins bonne notamment pour les états peu déformés. Toutefois, si on identifie  $a$  et  $\beta$  sur l'ensemble des données dont on dispose à  $-90^\circ\text{C}$  et  $-150^\circ\text{C}$  (figure E.78 et tableau E.6), la corrélation entre  $B$  et  $\langle \sigma_{mises} \rangle$  reste assez bonne. De plus, les valeurs de  $\alpha$  et  $\beta$  ainsi obtenues sont très proches de celles obtenues avec le premier agrégat.



- Compilation des résultats obtenus pour les agrégats n°1 et n°2 :



**Fig. E.79 :** Evolution de  $B$  en fonction de  $\langle \sigma_{mises} \rangle$  : compilation des résultats obtenus sur les agrégats n°1 et n°2

$T$ (°C)	$\alpha$	$\beta$	$R^2$
-196	0,567	-453	0,98
-150	0,562	-349	0,84
-90	0,528	-271	0,93
-60	0,485	-221	0,98

**Tableau E.7 :** Compilation des valeurs de  $\alpha$  et  $\beta$  obtenues pour les agrégats n°1 et n°2

Pour expliquer les différences d'un agrégat à l'autre, on peut invoquer l'effet de microstructure, la taille d'agrégat étant inférieure à la taille minimale de microstructure cristallographiquement représentative. Toutefois, cette taille de  $200 \times 200 \times 3 \mu\text{m}^3$  peut être considérée comme suffisante du point de vue des hétérogénéités de contraintes principales. Ainsi, il n'y a pas de différence significative entre les valeurs de  $\alpha$  et  $\beta$  identifiées sur l'agrégat n°1 et celles identifiées sur l'ensemble des deux microstructures. D'après la figure E.79, on peut supposer que la prise en compte de plusieurs réalisations de microstructure va surtout affecter la dispersion des valeurs de  $B$  autour de la moyenne. Cette hypothèse mériterait d'être vérifiée en réalisant d'autres simulations numériques sur d'autres microstructures.

La valeur  $B = 0$  doit en principe correspondre à la limite d'élasticité  $\sigma_y$  de l'agrégat polycristallin : en effet, on néglige l'anisotropie de déformation élastique, et les contraintes principales sont homogènes dans l'agrégat tant que  $\sigma_y$  n'est pas atteinte. D'après l'équation

(E.8), le paramètre  $B$  vaut 0 lorsque  $\langle \sigma_{mises} \rangle = \sigma_y$ . Cela nous permet de calculer une valeur approchée de  $\sigma_y$ :

$$\sigma_y = -\frac{\beta}{\alpha} \quad (\text{E.15})$$

Dans ce cas, la relation entre  $B$  et  $\langle \sigma_{mises} \rangle$  peut être exprimée très simplement ( $\langle \sigma_{mises} \rangle > \sigma_y$ ) :

$$B = \alpha(\langle \sigma_{mises} \rangle - \sigma_y) \quad (\text{E.16})$$

Le tableau E.8 montre la comparaison des valeurs de  $\sigma_y$  calculée numériquement à partir de  $a$  et  $b$  avec les valeurs expérimentales obtenues en traction simple à différentes températures. A  $-196$  et  $-150^\circ\text{C}$ , il est impossible de mesurer précisément la limite d'élasticité, du fait de la présence de paliers de Lüders sur les courbes expérimentales. A  $-90$  et  $-60^\circ\text{C}$ , les valeurs de  $\sigma_y$  sont très basses par rapport aux valeurs de limite d'élasticité.

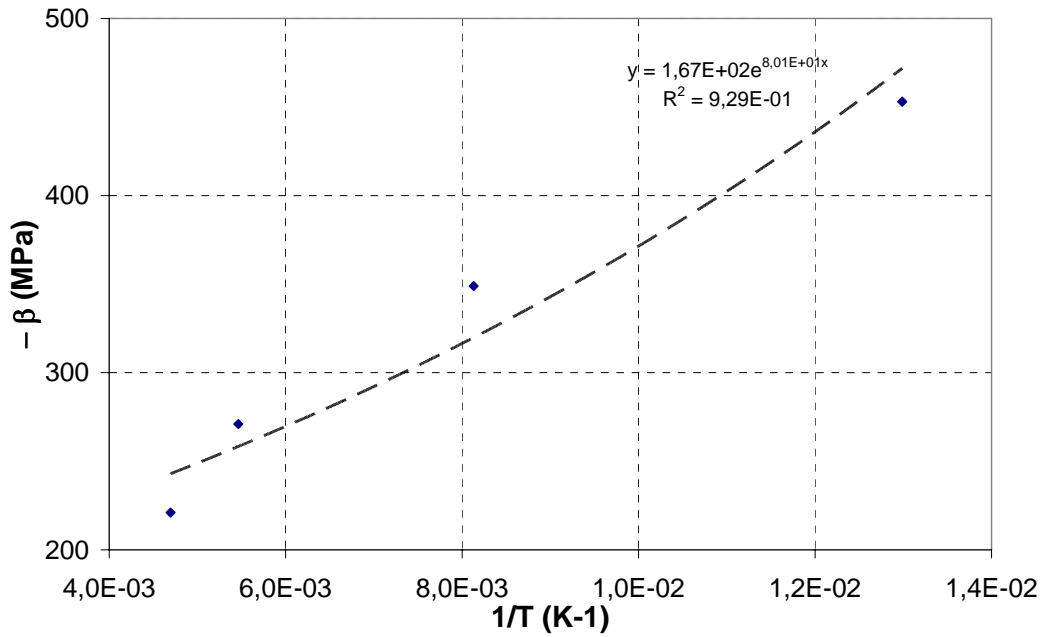
$T$ (K)	$\sigma_Y$	$\sigma_{Y\text{expérience}}$
-196	934	
-150	661	
-90	482	590
-60	390	550

**Tableau E.8 :** Calcul de  $\sigma_y = -\beta/\alpha$  et comparaison avec les valeurs expérimentales de limite d'élasticité

C'est notamment pour cette raison que nous n'avons pas exprimé  $B$  comme étant fonction de la limite d'élasticité macroscopique  $\sigma_y$ . Toutefois, on peut faire l'hypothèse que la dépendance  $\beta(T)$  résulte de la diminution de la limite d'élasticité en température. Cette décroissance étant de nature exponentielle, on propose une loi de type Arrhénius pour  $\beta(T)$  :

$$\beta(T) = \beta_0 \exp\left(-\frac{E_a}{k_B T}\right) \quad (\text{E.17})$$

Une identification des paramètres a été réalisée à partir des valeurs de  $\beta$  dont on dispose à  $T = -60^\circ\text{C}$ ,  $-90^\circ\text{C}$ ,  $-150^\circ\text{C}$  et  $-196^\circ\text{C}$ . En toute rigueur, il faudrait disposer de plus de valeurs de  $T$  pour identifier  $\beta_0$  et  $E_{gc}$ . On trouve  $\beta_0 = 170$  MPa et  $E_{gc} = 6,19 \cdot 10^{-3}$  eV (figure E.80).



**Fig. E.80** : Identification des paramètres  $\beta_0$  et  $E_{gc}$

**c) Paramétrisation de  $B$  en fonction de  $\langle \varepsilon_{eq} \rangle$**

Compte tenu des résultats intéressants obtenus en exprimant  $B$  comme fonction de  $\langle \sigma_{mises} \rangle$ , il a également été envisagé d'étudier l'effet de la déformation moyenne  $\langle \varepsilon_{eq} \rangle$ . Il reste néanmoins difficile de paramétriser l'évolution de  $B$  en fonction de  $\langle \varepsilon_{eq} \rangle$  (figure E.81).

- Agrégat n°1 :

Dans une première approche et pour l'agrégat n°1, nous avons corrélé les valeurs de  $B$  à celles de  $\langle \varepsilon_{eq} \rangle$  par une loi de type logarithmique unique (figure E.82). La fonction est du type :

$$B = \alpha \text{Ln}(\langle \varepsilon_{eq} \rangle) + \beta \quad (\text{E.18})$$

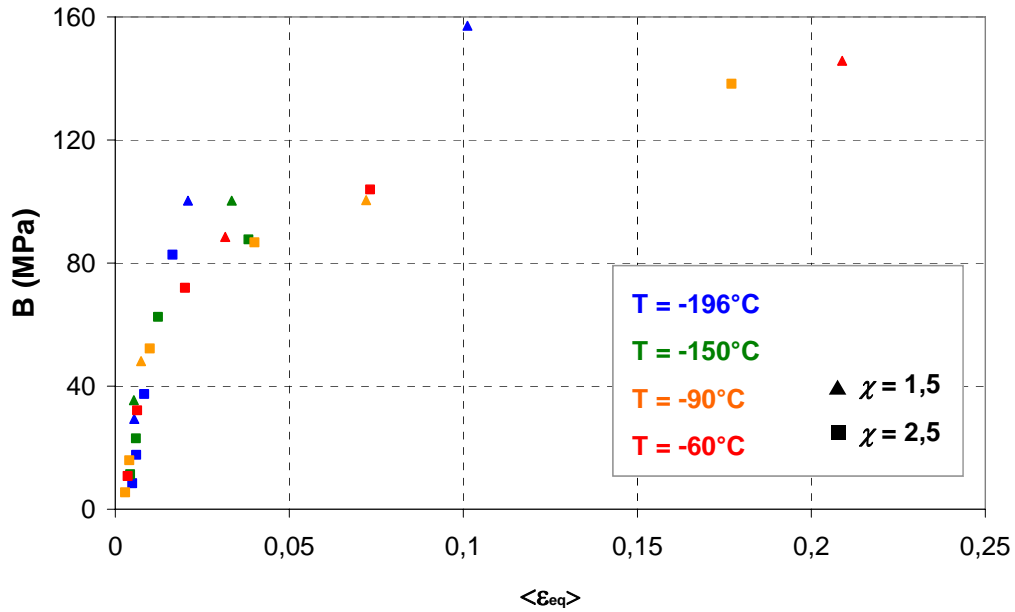


Fig. E.81 : Paramètre  $B$  exprimé en fonction de  $\langle \varepsilon_{eq} \rangle$  (agrégat n°1)

L'identification d'une telle fonction n'est pas satisfaisante : certains points sont très éloignés de la courbe identifiée, surtout pour les états les plus déformés (lorsque  $\langle \varepsilon_{eq} \rangle$  excède 5 %). Or, dans le cadre de l'étude de la rupture fragile, les états les plus chargés sont ceux qui nous intéressent le plus. De plus, ce type d'approche ne permet pas d'introduire un effet de la température. Cette paramétrisation universelle a donc été abandonnée.

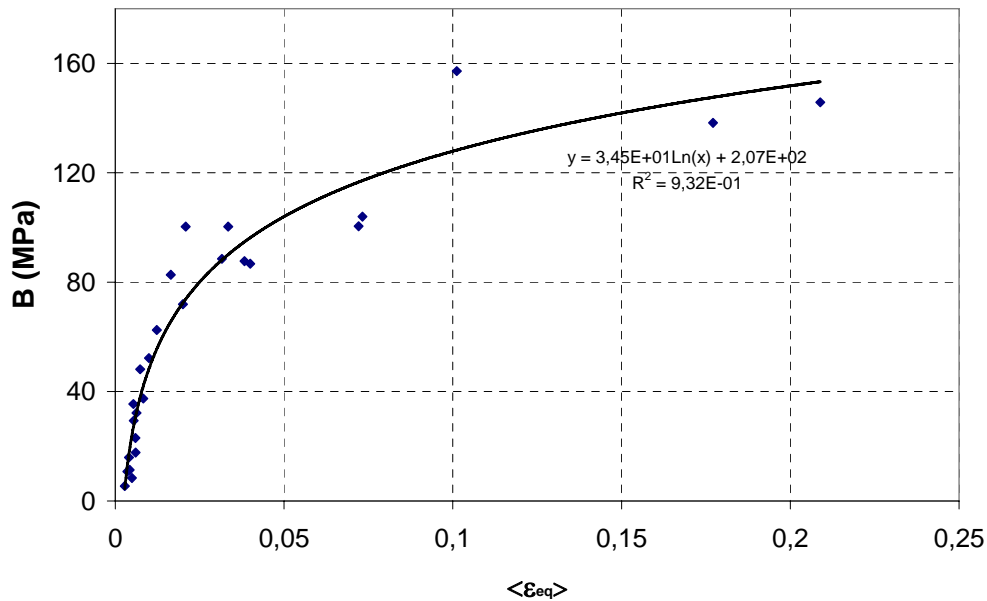
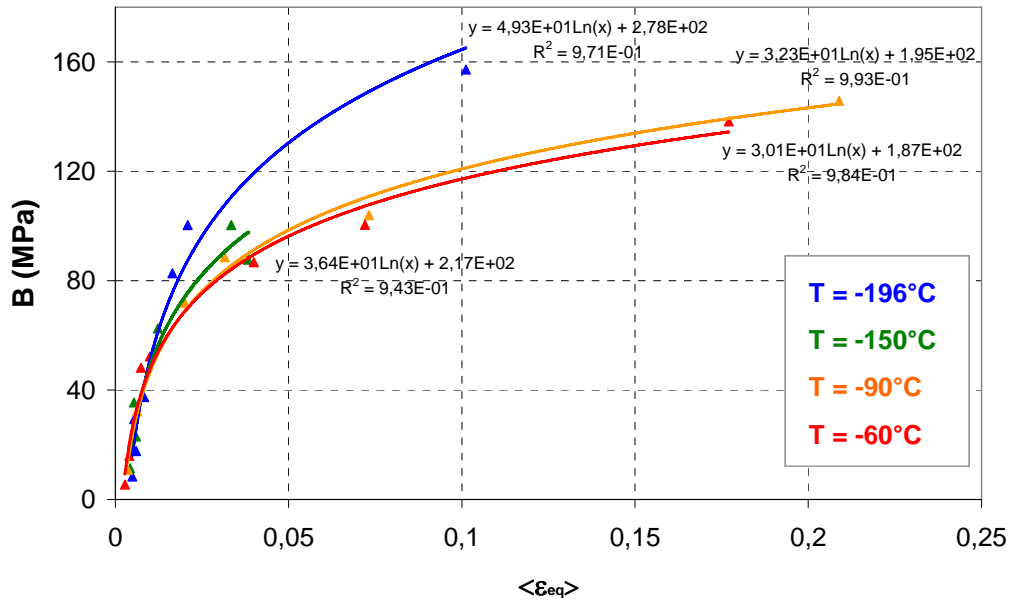


Fig. E.82 : Identification d'une fonction logarithmique universelle du type  $B = \alpha \ln(\langle \varepsilon_{eq} \rangle) + \beta$  (agrégat n°1)

Par la suite la même démarche a été appliquée mais séparément pour chaque température. La corrélation est alors beaucoup plus satisfaisante (figure E.83), et ce pour quelle que soit la température.



**Fig. E.83 :** Identification d'une fonction logarithmique du type  $B = \alpha \ln(\langle \varepsilon_{eq} \rangle) + \beta$  pour chaque valeur de  $T$  (agrégat n°2).

D'autre part, il apparaît clairement que la courbe  $B = f(T)$  est située d'autant plus haut sur le graphique que  $T$  est faible. Cette corrélation montre que les paramètres  $\alpha$  et  $\beta$  doivent être dépendants de  $T$ .  $\alpha$  est une fonction croissante de  $T$ , tandis que  $\beta$  décroît lorsque  $T$  augmente (tableau E.9).

$T$ (°C)	$\alpha$ (MPa)	$\beta$ (MPa)
-196	49,3	278
-150	36,4	217
-90	32,3	195
-60	30,1	187

**Tableau E.9 :** Loi  $B = \alpha \ln(\langle \varepsilon_{eq} \rangle) + \beta$  : identification de  $\alpha$  et  $\beta$  (agrégat n°1)

- Agrégat n°2 :

Même si la paramétrisation  $B = f(\langle \varepsilon_{eq} \rangle)$  n'a pas été retenue pour des raisons d'ordre pratique, nous avons étendu la validité de ce type de paramétrisation sur les résultats obtenus avec l'agrégat n°2. On peut formuler les mêmes remarques que pour l'agrégat n°1 : une loi universelle ne peut pas convenir (figure E.85). L'identification de  $\alpha$  et  $\beta$  à  $T = -90^\circ\text{C}$  et  $-150^\circ\text{C}$  conduit à des valeurs légèrement différentes de celles obtenues pour le premier agrégat.

Le problème reste de trouver une fonction pour corrélérer ces valeurs de  $\alpha$  et  $\beta$  en température, mais les résultats montrent cependant la faible influence de la microstructure sur ce type de paramétrisation  $B = f(\langle \varepsilon_{eq} \rangle)$ .

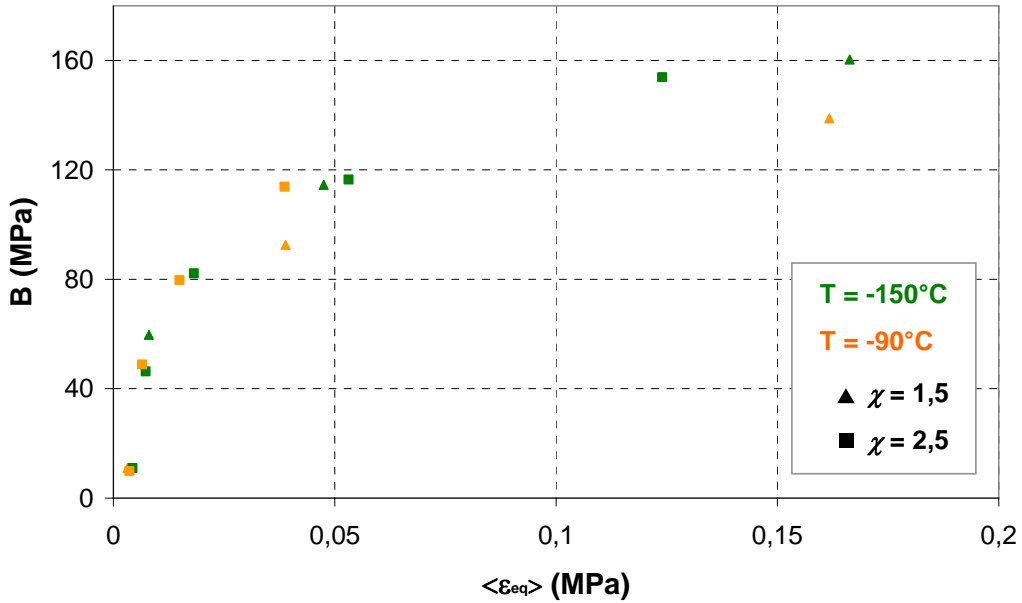


Fig. E.84 : Paramètre  $B$  exprimé en fonction de  $\langle \varepsilon_{eq} \rangle$  (agrégat n°2)

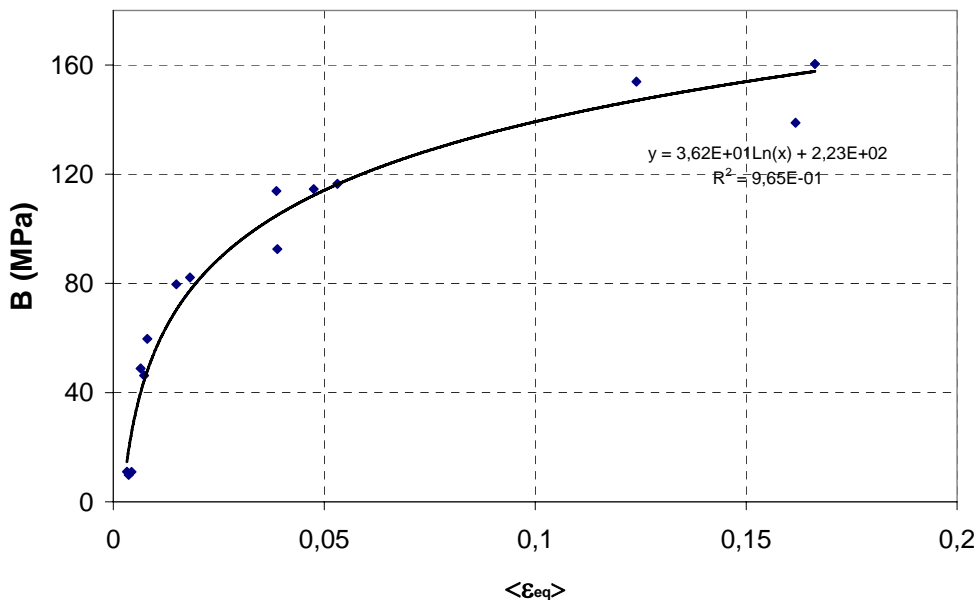
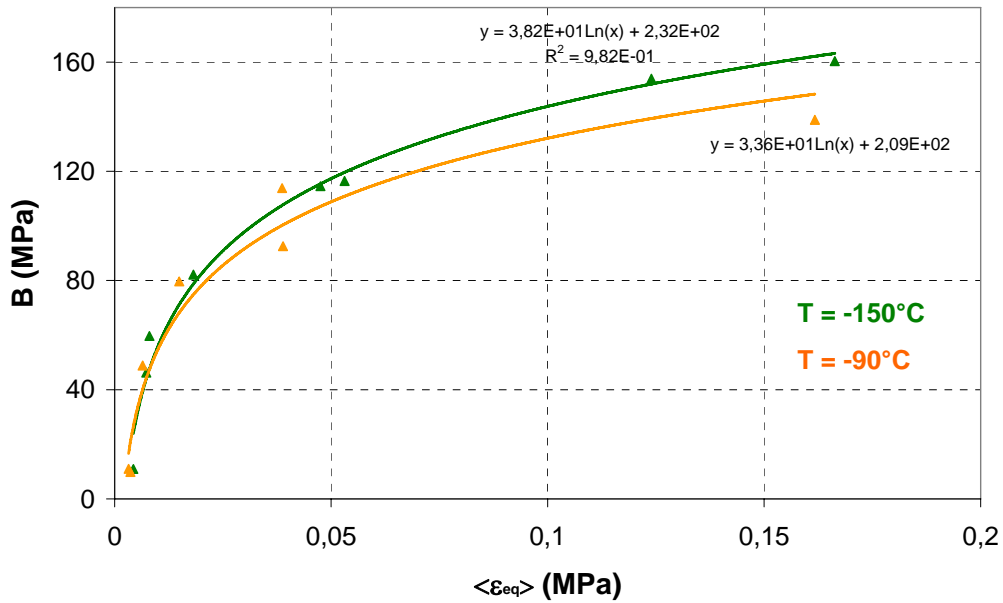


Fig. E.85 : Identification d'une fonction logarithmique universelle du type  $B = \alpha \ln(\langle \varepsilon_{eq} \rangle) + \beta$  (agrégat n°2)



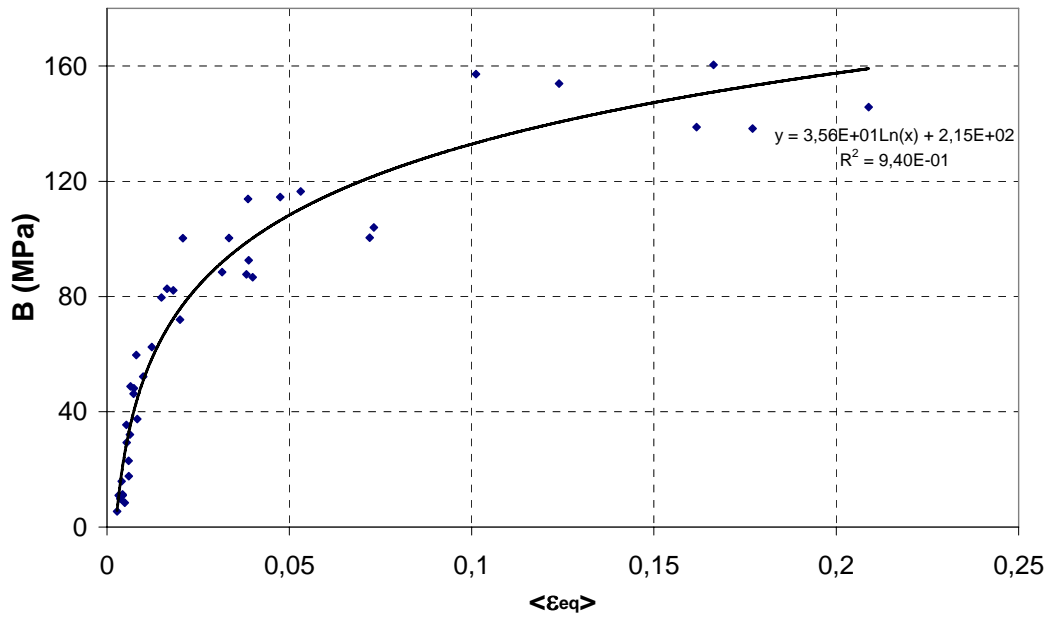
**Fig. E.86 :** Identification d'une fonction logarithmique du type  $B = \alpha \ln(\langle \varepsilon_{eq} \rangle) + \beta$  pour chaque valeur de  $T$  (agrégat n°2)

$T$ (°C)	$\alpha$	$\beta$
-150	38,2	232
-90	33,6	209

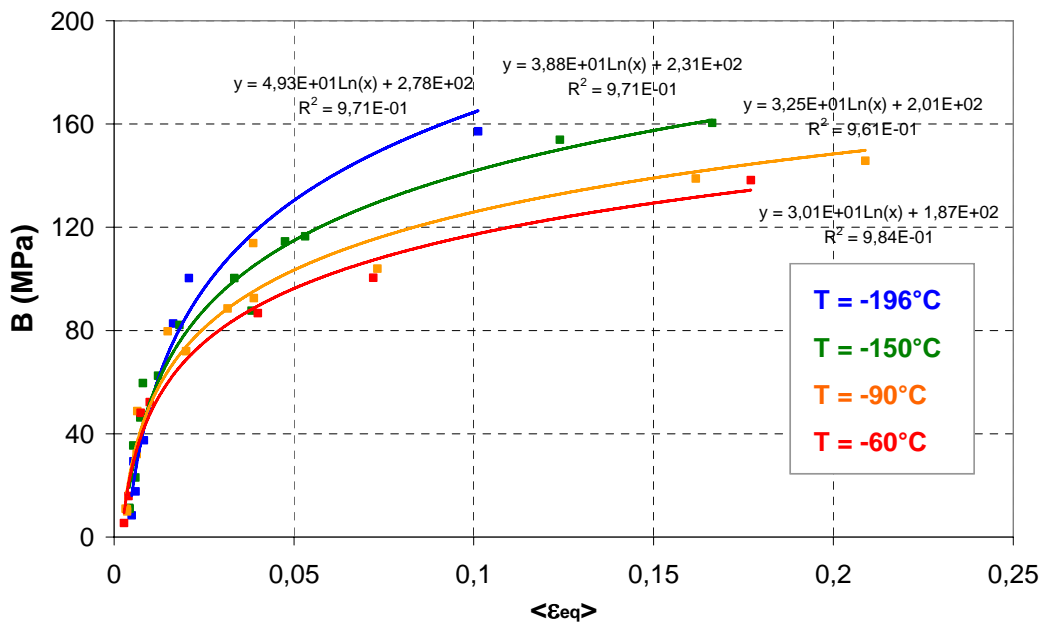
**Tableau E.10 :** Loi  $B = \alpha \ln(\langle \varepsilon_{eq} \rangle) + \beta$  : identification de  $\alpha$  et  $\beta$  (agrégat n°2)

- Compilation des résultats obtenus pour les agrégats n°1 et n°2 :

Si on compile les données correspondants aux agrégats n°1 et n°2, on constate toujours qu'il est préférable d'identifier la loi  $B = f(\langle \varepsilon_{eq} \rangle)$  séparément pour chaque valeur de  $T$  (cf. figures E.87 et E.88). La comparaison des tableaux E.9 E.10 et E.11 montre que l'identification de  $\alpha$  et  $\beta$  est assez peu sensible à l'effet de la microstructure. Le seul problème consiste à décrire l'évolution de  $\alpha$  et  $\beta$  en température : c'est pourquoi nous avons gardé une loi en contrainte  $B = f(\langle \sigma_{mises} \rangle)$ , plus facile à identifier.



**Fig. E.87 :** Identification d'une fonction logarithmique universelle du type  $B = \alpha \ln(\langle \varepsilon_{eq} \rangle) + \beta$  (agrégats n°1 et n°2)



**Fig. E.88 :** Identification d'une fonction logarithmique du type  $B = \alpha \ln(\langle \varepsilon_{eq} \rangle) + \beta$  pour chaque valeur de  $T$  (agrégats n°1 et n°2)



$T$ (°C)	$\alpha$	$\beta$
-196	49,3	278
-150	38,8	231
-90	32,5	201
-60	30,1	187

**Tableau E.11** : Loi  $B = \alpha \text{Ln}(<\varepsilon_{eq}) + \beta$  : identification de  $\alpha$  et  $\beta$  (agrégat n°1 et n°2)

#### E.4.e Tentative d'identification d'une fonction de distribution de type Gumbel de deuxième espèce sur les hétérogénéités de $\sigma_I$

La fonction de Gumbel de deuxième espèce est donnée par l'équation (E.10) et elle fait intervenir deux paramètres indépendants, la constante  $A$  et l'exposant  $m$ . A partir de cette équation, on peut écrire le terme  $\text{Ln}(-\text{Ln}(P(\sigma_I < \sigma)))$  comme une fonction linéaire de  $\text{Ln}(\sigma)$  :

$$\text{Ln}[-\text{Ln}[P(\sigma_I < \sigma)]] = m[\text{Ln}(\sigma) - \text{Ln}(A)] \quad (\text{E.19})$$

Cette relation permet d'identifier  $A$  et  $m$  :  $m$  est donné par la pente de la droite et  $m \text{Ln}(A)$  correspond à l'ordonnée à l'origine. Seuls quelques cas de figures sont présentés à titre d'exemple : l'équation (E.19) est d'autant mieux vérifiée que la déformation est faible : à  $T = -150^\circ\text{C}$  ou  $-196^\circ\text{C}$  et pour  $\chi = 2,5$  (figures E.91 et E.92). Par contre l'accord est moins satisfaisant à  $T = 60^\circ\text{C}$  ou  $-90^\circ\text{C}$  et  $\chi = 1,5$ , surtout si on considère les états les plus déformés (figures E.89 et E.90). Globalement, il semble que la fonction de Gumbel de seconde espèce décrit moins bien les hétérogénéités de contraintes principales que la fonction de première espèce.

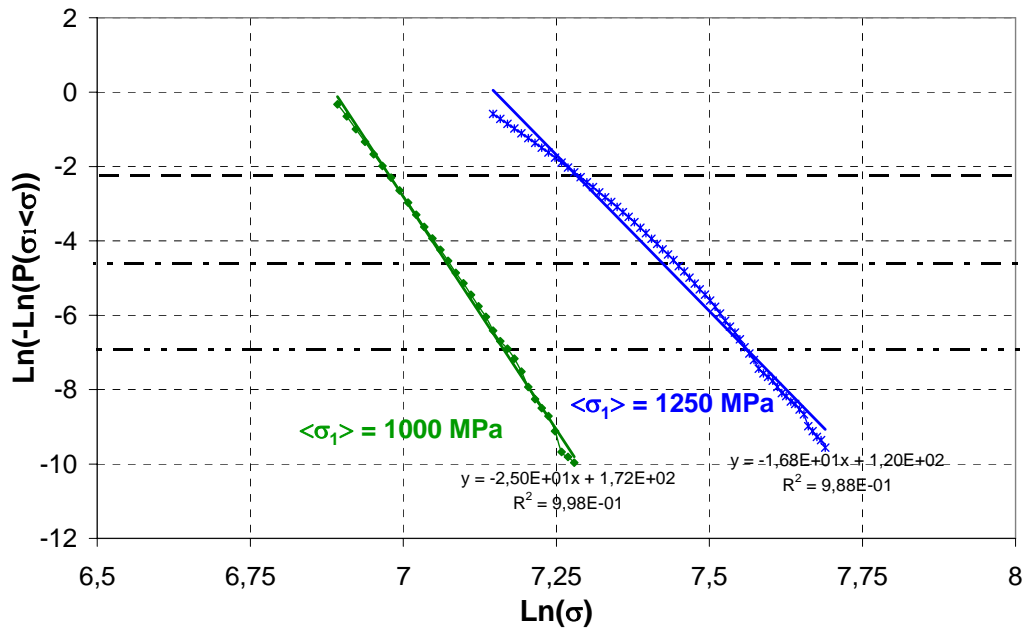


Fig. E.89 : Identification des paramètres  $A$  et  $m$  de la fonction de Gumbel de seconde espèce sur les résultats de l'agrégat n°1  $\{T = -60^\circ\text{C}, \chi = 1,5\}$

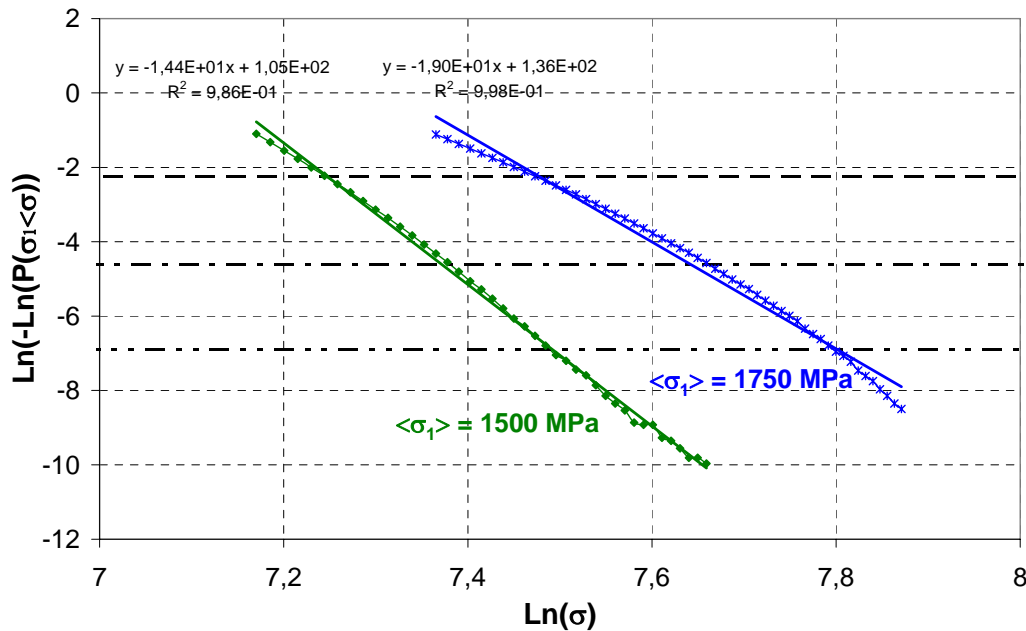


Fig. E.90 : Identification des paramètres  $A$  et  $m$  de la fonction de Gumbel de seconde espèce sur les résultats de l'agrégat n°1  $\{T = -90^\circ\text{C}, \chi = 2,5\}$

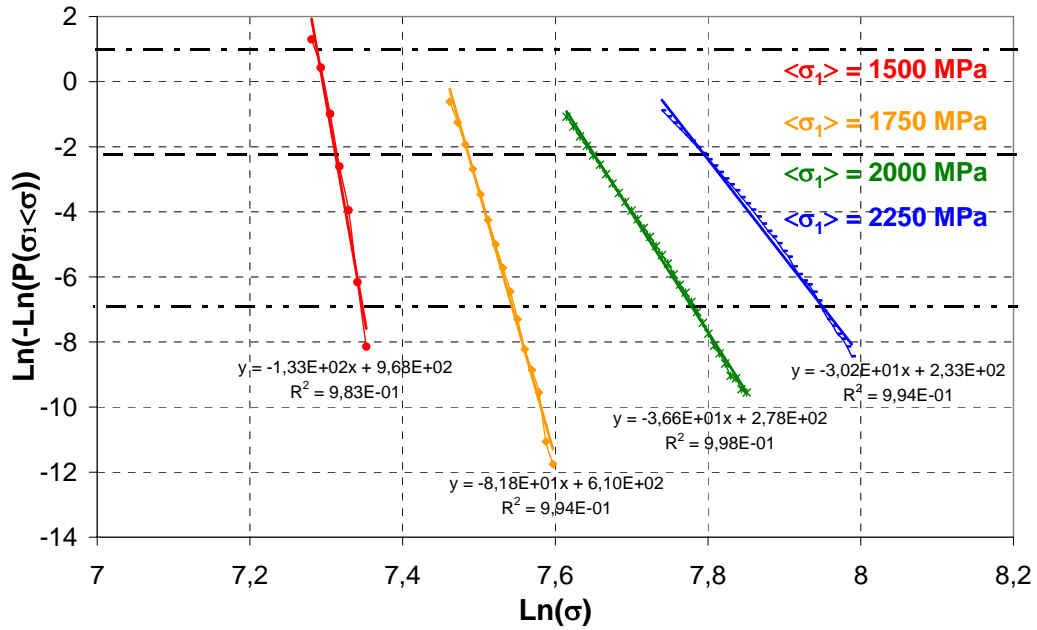


Fig. E.91 : Identification des paramètres  $A$  et  $m$  de la fonction de Gumbel de seconde espèce sur les résultats de l'agrégat n°1  $\{T = -150^\circ\text{C}, \chi = 1,5\}$

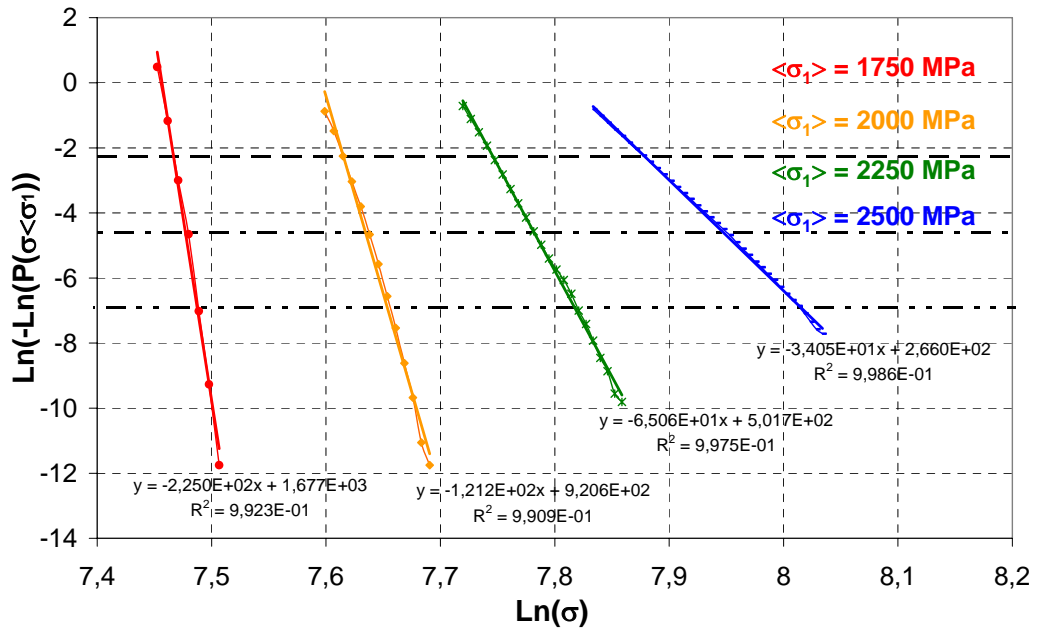


Fig. E.92 : Identification des paramètres  $A$  et  $m$  de la fonction de Gumbel de seconde espèce sur les résultats de l'agrégat n°1  $\{T = -150^\circ\text{C}, \chi = 2,5\}$

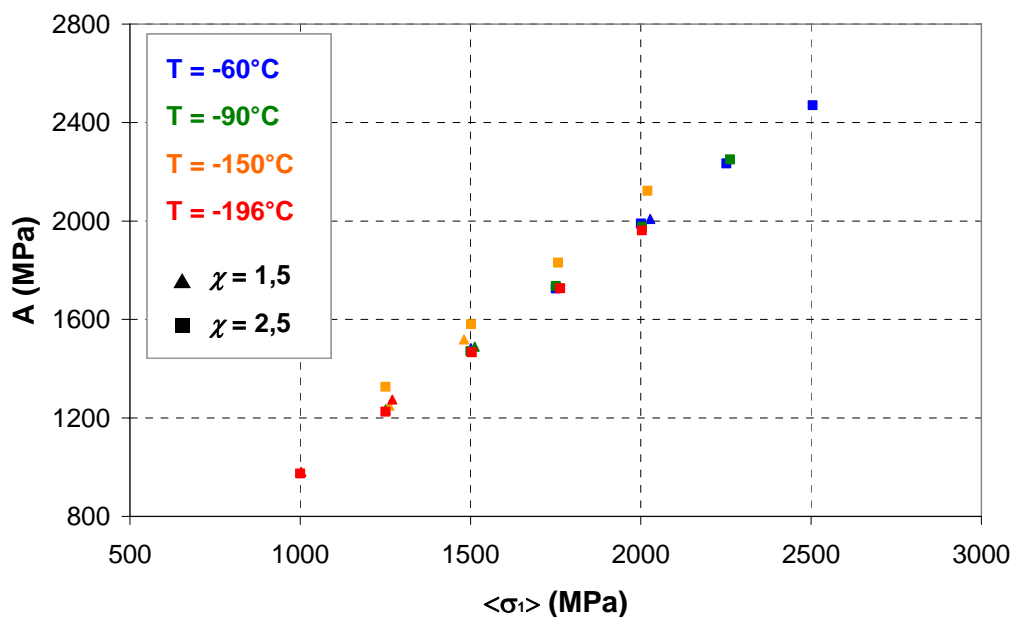
L'ensemble des valeurs de  $A$  et  $m$  obtenues par régression linéaire sont données dans le tableau E.12 ci-dessous :

Température (°C)	$\chi = 1,5$			$\chi = 2,5$		
	$\langle \sigma_1 \rangle$	A	m	$\langle \sigma_1 \rangle$	A	m
-196	1250			1750	1726	225
	1501	1484	56	2000	1990	121
	1758	1735	22	2251	2234	65
	2028	2008	16	2505	2470	34
-150	1000			1500	1471	133
	1251	1236	40	1751	1736	82
	1512	1490	19	2004	1977	37
				2262	2250	30
-90	1000			1250	1327	126
	1262	1250	19	1501	1581	55
	1481	1519	14	1757	1831	30
				2020	2123	25
-60	750			1000	974,5	180
	1003	981	25	1250	1226	82
	1270	1275	17	1504	1467	33
				1763	1727	24
			2003	1962	17	

**Tableau E.12 :** Valeurs de  $A$  et  $m$  identifiées d'après les simulations réalisées sur l'agrégat n°1

**a) Paramétrisation de  $A$  en fonction de  $\langle \sigma_1 \rangle$**

Comme pour la fonction de Gumbel de première espèce, nous avons cherché à relier le paramètre  $A$  à la contrainte principale moyenne  $\langle \sigma_1 \rangle$  dans l'agrégat n°1. Les figures E.93 et E.94 montrent que  $A$  est identifiable à  $\langle \sigma_1 \rangle$ , et ce avec un excellent coefficient de corrélation.



**Fig. E.93 :** Evolution de  $A$  en fonction de  $\langle \sigma_1 \rangle$  (agrégat n°1)

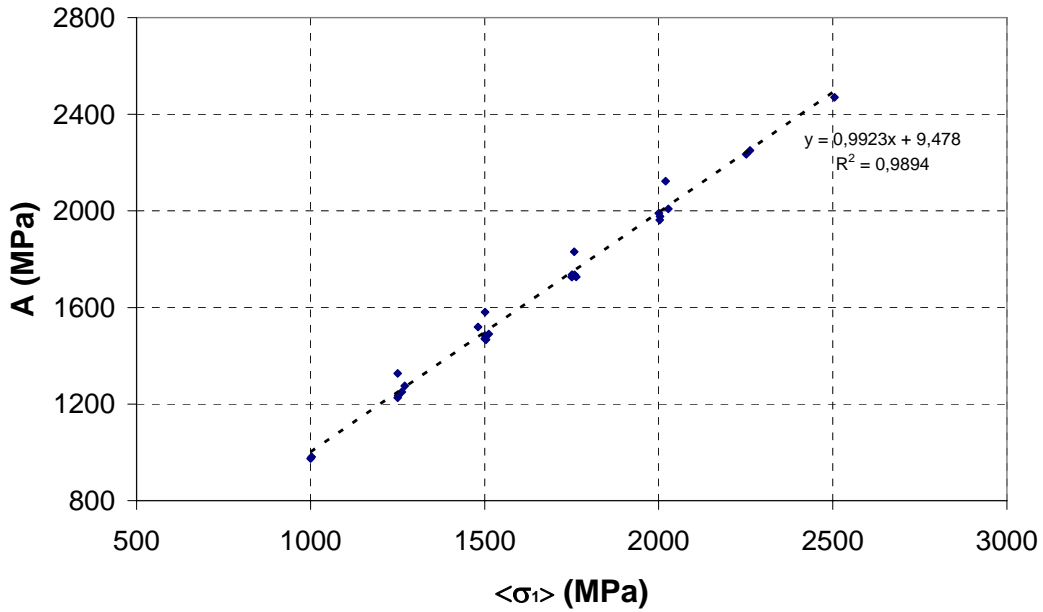


Fig. E.94 : Vérification de la loi  $A = \langle \sigma_I \rangle$  (agrégat n°1)

**b) Paramétrisation de  $m$  en fonction de  $\langle \sigma_I \rangle$ ,  $\langle \sigma_{mises} \rangle$  et  $\langle \epsilon_{eq} \rangle$**

Dans la fonction de Gumbel de seconde espèce, le paramètre  $m$  traduit le niveau d'hétérogénéité. Il a d'abord été représenté en fonction de  $\langle \sigma_I \rangle$  (figure E.95). Il n'y a pas de relation évidente entre  $m$  et  $\langle \sigma_I \rangle$ . Contrairement à la fonction de Gumbel de première espèce, la contrainte équivalente moyenne  $\langle \sigma_{mises} \rangle$  ne décrit pas de manière satisfaisante l'évolution de  $m$ . L'utilisation de fonctions de corrélation de type linéaire, exponentielle, logarithmique ou puissance n'aboutissent pas à un résultat concluant (figures E.96 et E.97). Il n'est ainsi pas possible d'appliquer au paramètre  $m$  la paramétrisation  $B = f(\langle \sigma_{mises} \rangle)$  qui est proposée pour la fonction de première espèce.

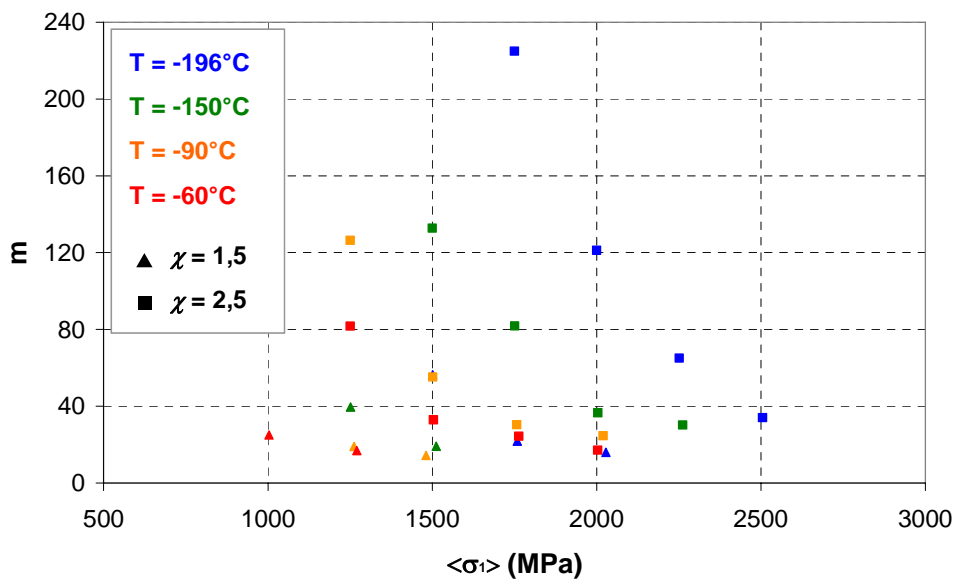


Fig. E.95 : Evolution du paramètre  $m$  en fonction de  $\langle \sigma_I \rangle$  (agrégat n°1)

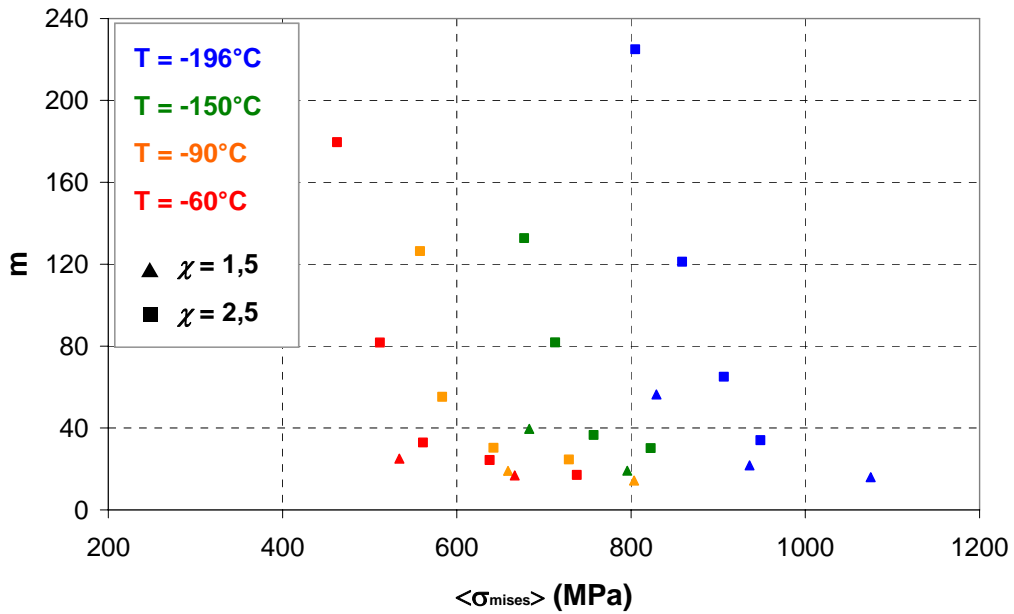


Fig. E.96 : Evolution du paramètre  $m$  en fonction de  $\langle \sigma_{mises} \rangle$  (agrégat n°1)

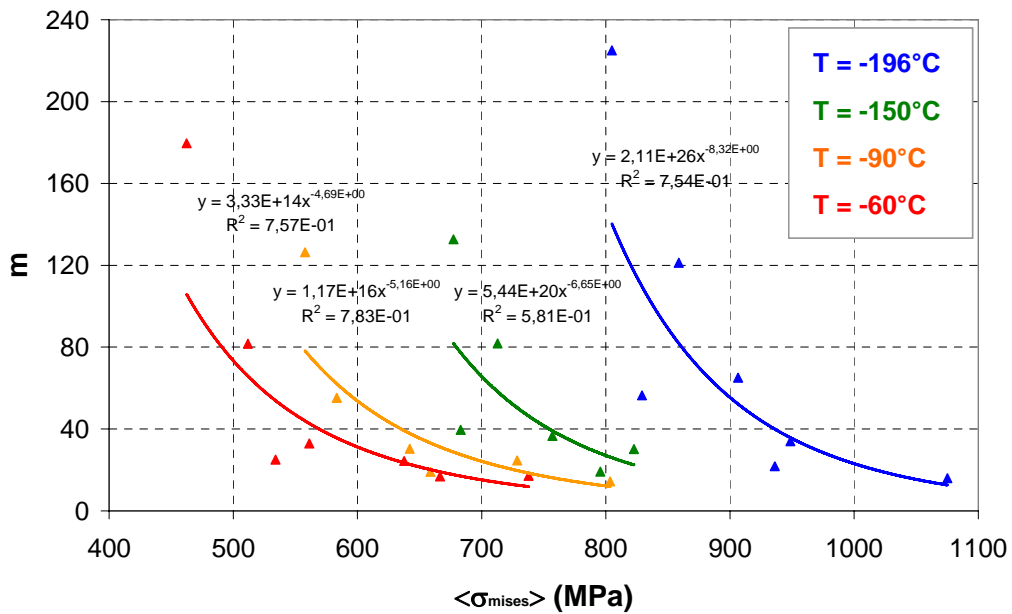


Fig. E.97 : Identification d'une loi de type puissance  $m = \alpha \langle \sigma_{mises} \rangle^{-\beta}$  (non concluant)

Nous avons également étudié la corrélation entre  $m$  et la déformation équivalente  $\langle \varepsilon_{eq} \rangle$  (figure E.98). On montre qu'il est possible de relier  $m$  à  $\langle \varepsilon_{eq} \rangle$  par une relation de type puissance (figures E.99 et E.100). Cependant, les résultats suggèrent que cette relation ne semble pas faire intervenir la température.

Cela implique que la description des hétérogénéités ne serait alors fonction de la température que par l'intermédiaire de  $\langle \sigma_l \rangle$  :

$$P(\sigma_l < \sigma) = \exp\left(-\left(\frac{\langle \sigma_l \rangle}{\sigma}\right)^m\right) \quad (\text{E.20})$$

avec :

$$m = \alpha \left(\langle \varepsilon_{eq} \rangle\right)^{-\beta} \quad (\text{E.21})$$

L'identification de la loi de type puissance (équation (E.21)) demeure cependant assez aléatoire (cf. figures E.99 et E.100) compte tenu du nombre restreint d'états fortement déformés dont on dispose.

D'autre part, il faut souligner que la fonction de Gumbel de deuxième espèce n'est pas toujours en accord avec les distributions simulées numériquement, et que l'identification des paramètres  $A$  et  $m$  reste justement sujette à caution pour les états fortement déformés. C'est pour ces raisons que ce type de distribution n'a pas été exploité dans le cadre de l'approche locale de la rupture par clivage.

Toutefois, sous réserve de résolution des problèmes cités plus haut, ce type de description paramétrique assez simple pourrait offrir une alternative intéressante à celle qui a été adoptée.

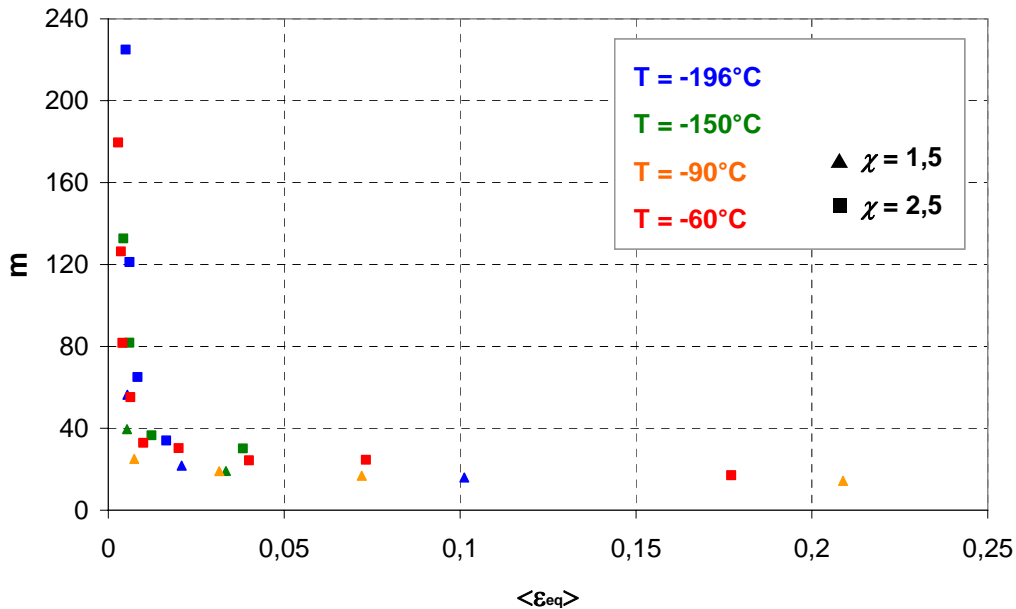
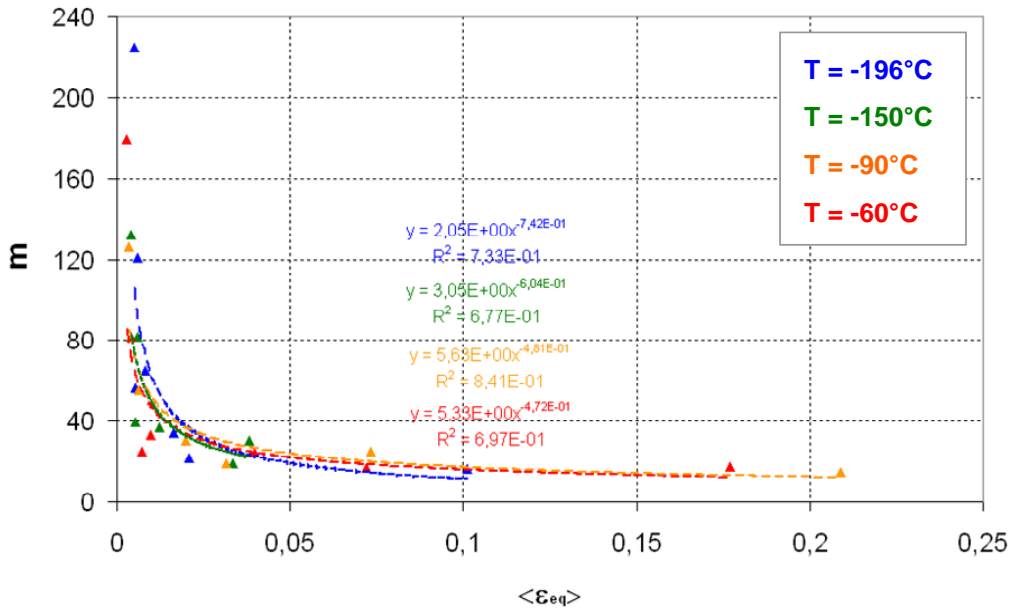
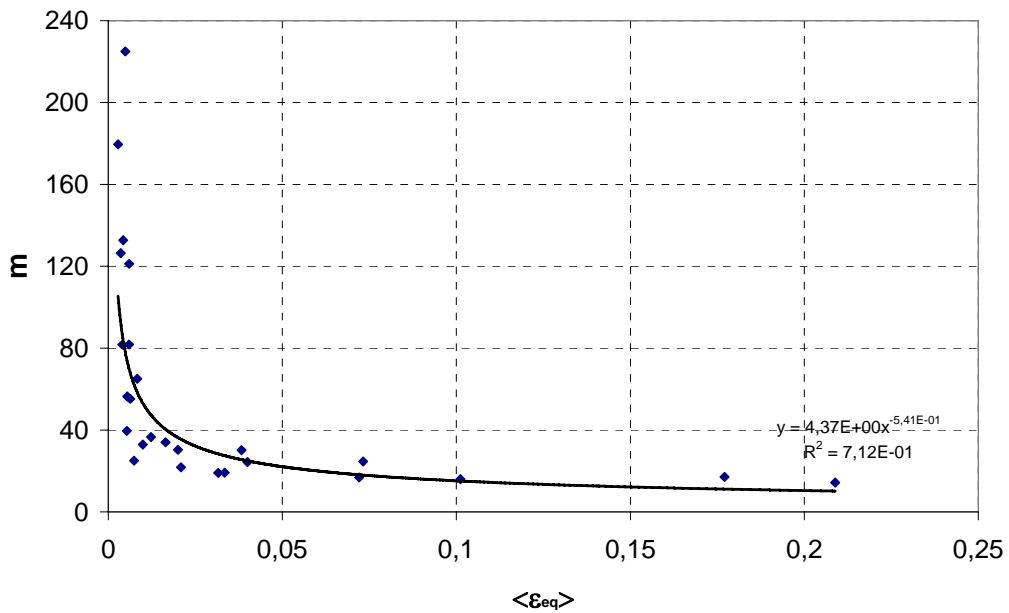


Fig. E.98 : Evolution du paramètre  $m$  en fonction de  $\langle \varepsilon_{eq} \rangle$  (agrégat n°1)



**Fig. E.99** : Identification d'une loi de type puissance  $m = \alpha \langle \varepsilon_{eq} \rangle^{-\beta}$  indépendamment pour chaque valeur de  $T$  (agrégat n°1)



**Fig. E.100** : Identification d'une loi de type puissance universelle  $m = \alpha \langle \varepsilon_{eq} \rangle^{-\beta}$  quelle que soit  $T$  (agrégat n°1)



Température (°C)	$\chi = 1,5$				$\chi = 2,5$			
	$\langle \sigma_I \rangle$	$\langle \varepsilon_{eq} \rangle$	$\langle \sigma_{mises} \rangle$	$m$	$\langle \sigma_I \rangle$	$\langle \varepsilon_{eq} \rangle$	$\langle \sigma_{mises} \rangle$	$m$
-196	1250	0,004	711		1750	0,005	805	225
	1501	0,005	829	56	2000	0,006	859	121
	1758	0,021	936	22	2251	0,008	907	65
	2028	0,101	1075	16	2505	0,016	949	34
-150	1000	0,003	569		1500	0,004	677	133
	1251	0,005	683	40	1751	0,006	713	82
	1512	0,033	796	19	2004	0,012	757	37
		0,193			2262	0,038	823	30
-90	1000	0,003	569		1250	0,004	558	126
	1262	0,032	659	19	1501	0,006	583	55
	1481	0,209	804	14	1757	0,020	642	30
					2020	0,073	729	25
-60	750	0,002	427		1000	0,003	462	180
	1003	0,007	534	25	1250	0,004	512	82
	1270	0,072	666	17	1504	0,010	561	33
					1763	0,040	638	24
				2003	0,177	738	17	

**Tableau E.13 :** Récapitulatif de l'évolution des valeurs de  $m$  en fonction de  $\langle \sigma_I \rangle$ ,  $\langle \sigma_{mises} \rangle$  et  $\langle \varepsilon_{eq} \rangle$  (agrégat n°1)

#### E.4.f Identification d'une fonction de type Weibull

La fonction de Weibull (équation (E.11)) fait intervenir deux paramètres : l'exposant de Weibull  $m$  et la contrainte de normalisation  $\sigma_u$ .  $m$  traduit l'hétérogénéité de la distribution, tandis que  $\sigma_u$  correspond à la contrainte principale moyenne. Afin de tester la validité d'une fonction de type Weibull et d'identifier  $m$  et  $\sigma_u$ , on linéarise l'équation (E.11) :

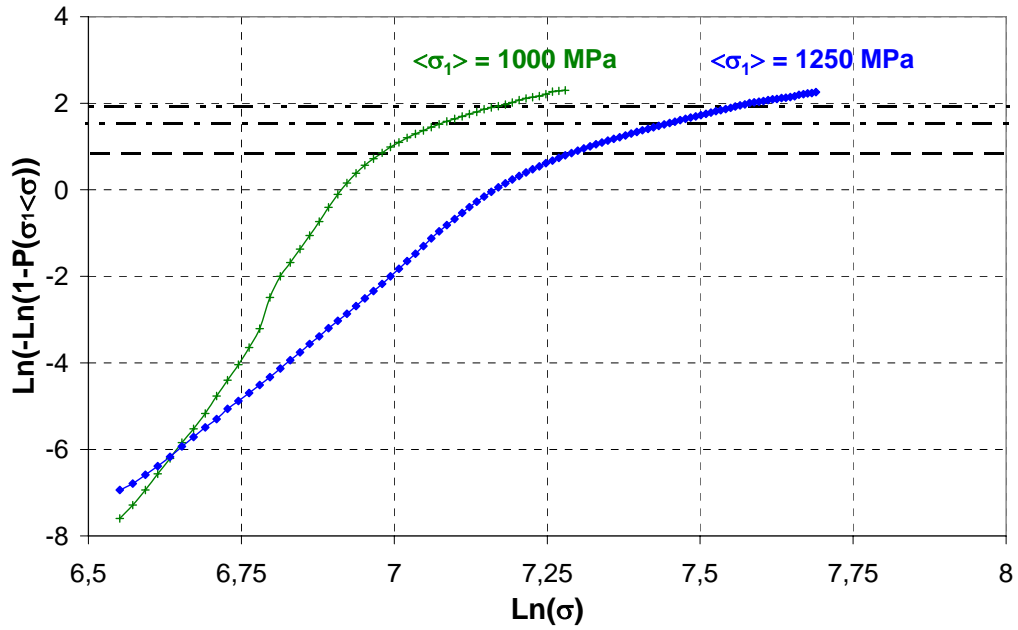
$$\ln(1 - P(\sigma_I < \sigma)) = - \left( \frac{\sigma}{\sigma_u} \right)^m \quad (E.22)$$

D'où l'expression :

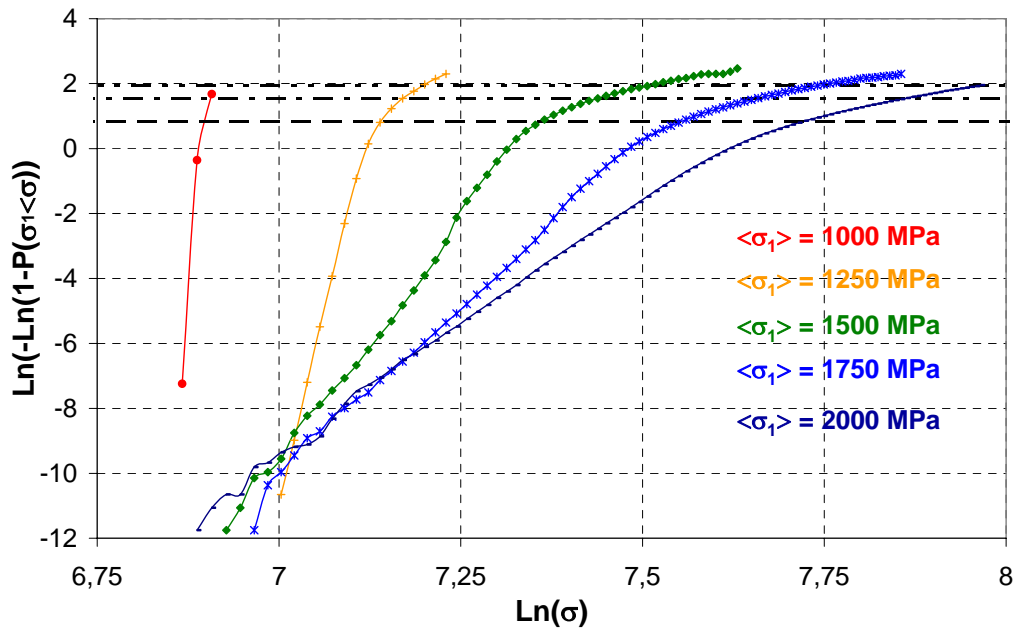
$$\ln[-\ln(1 - P(\sigma_I < \sigma))] = m \ln(\sigma) - m \ln(\sigma_u) \quad (E.23)$$

Si la distribution des contraintes principales dans l'agrégat suit bien une distribution de type Weibull, la fonction  $\ln(-\ln(1 - P(\sigma_I < \sigma)))$  doit dépendre linéairement de  $\ln(\sigma)$ . Le coefficient directeur de la droite vaut alors  $m \ln(\sigma)$  et l'ordonnée à l'origine est donnée par  $m \ln(\sigma_u)$ , ce qui permet d'identifier  $m$  et  $\sigma_u$ .

Les figures E.101 et E.102 montrent que la dépendance n'est pas linéaire, tout du moins pas pour les queues de distribution de  $\sigma_I$ . Par contre, ce type de fonction décrit de manière satisfaisante la distribution des valeurs minimales de  $\sigma_I$  dans l'agrégat. Les figures E.103 et E.104 montrent qu'il n'est pas possible d'identifier les paramètres  $m$  et  $\sigma_u$  du fait de la non linéarité constatée pour les fortes valeurs de  $\sigma_I$ .



**Fig. E.101** : Représentation de la fonction  $\text{Ln}(-\text{Ln}(1-P(\sigma_1 < \sigma))) = f(\text{Ln}(\sigma))$  pour  $T = -60^\circ\text{C}$  et  $\chi = 1,5$  (agrégat n°1)



**Fig. E.102** : Représentation de la fonction  $\text{Ln}(-\text{Ln}(1-P(\sigma_1 < \sigma))) = f(\text{Ln}(\sigma))$  pour  $T = -60^\circ\text{C}$  et  $\chi = 2,5$  (agrégat n°1)

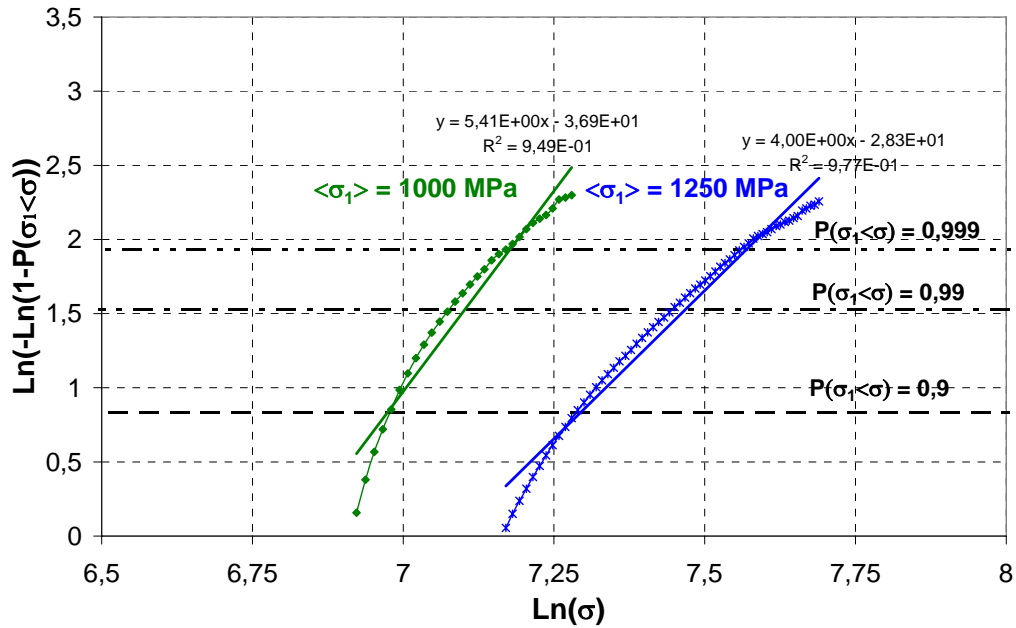


Fig. E.103 : Tentative d'identification de la fonction de Weibull  $\{T = -60^{\circ}\text{C} , \chi = 1,5\}$

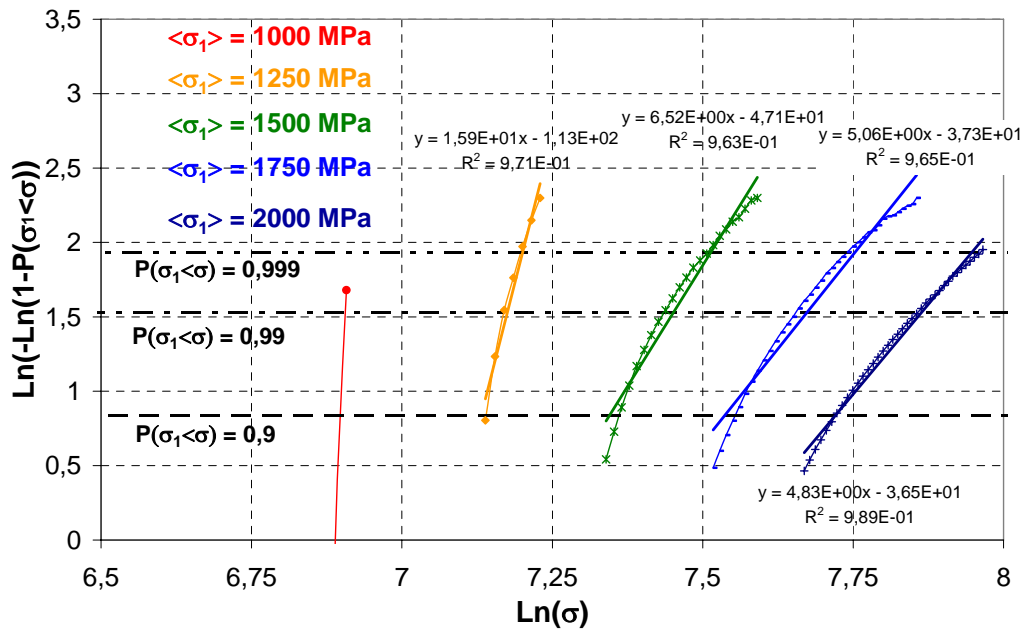


Fig. E.104 : Tentative d'identification de la fonction de Weibull  $\{T = -60^{\circ}\text{C} , \chi = 2,5\}$

Ce résultat confirme qu'il est absolument nécessaire de faire appel à des distributions de type 'valeurs extrêmes' pour décrire les valeurs de contrainte principale dans l'agrégat, et que la fonction de distribution de type Weibull n'est pas pertinente.

Annexe F

**Modélisation d'approche locale de la rupture**

## TABLE DES MATIERES

### F. Modélisation d'approche locale de la rupture

<b>F.1</b>	<b>Quelques modèles d'approche locale de la rupture .....</b>	<b>373</b>
<i>F.1.a</i>	<i>Le modèle de Margolin .....</i>	<i>373</i>
<i>F.1.b</i>	<i>Le modèle de Kroon, Faleskog et Örborg .....</i>	<i>374</i>
<i>F.1.c</i>	<i>Le modèle EOH .....</i>	<i>375</i>
<b>F.2</b>	<b>Critère d'amorçage du clivage prenant en compte les défauts et les hétérogénéités de champs mécaniques : résultats .....</b>	<b>376</b>
<i>F.2.a</i>	<i>Etude à <math>\langle \mathcal{E}_{eq} \rangle</math> fixée : évolution de la fonction <math>dPR_0 = f(r_c)</math> en fonction de <math>T</math> et <math>\chi</math>. .....</i>	<i>376</i>

## F.1 Quelques modèles d'approche locale de la rupture

Cette partie présente une revue de quelques modèles d'approche locale de la rupture : ces modèles font appel à d'autres hypothèses que celles utilisées dans le modèle de Beremin et dérivés ou dans le modèle WST. Ces modèles proposent notamment différentes approches permettant de prendre en compte la nucléation des défauts de clivage sous l'effet du chargement mécanique.

### F.1.a Le modèle de Margolin

Il s'agit d'une modélisation basée sur la théorie du maillon le plus faible [MAR98]. Dans chacun des maillons, deux conditions portant sur la contrainte principale  $\sigma_I$  doivent être remplies pour qu'il y ait rupture :

$$\sigma_I + m_{T\varepsilon}(\sigma_{eq} - \sigma_Y) \geq \sigma_d \quad (\text{F.1})$$

$$\sigma_I \geq S_C(\varepsilon_p) \quad (\text{F.2})$$

L'équation (F.1) correspond à la condition de nucléation des micro-défauts. La constante  $\sigma_d$  désigne la résistance des particules.  $\sigma_{eq}$  et  $\sigma_Y$  désignent respectivement la contrainte équivalente et la limite d'élasticité et  $m_{T\varepsilon}$  est un paramètre dépendant à la fois de la température et de la déformation.

L'équation (F.2) décrit la condition de propagation instable sur un micro-défaut déjà nucléé. Le terme  $S_C$  correspond à la contrainte critique d'instabilité du défaut et son expression est définie par :

$$S_C(\varepsilon_p) = \left[ C_1^* + C_2^* \exp\left(-A_d \int d\varepsilon_p^{eq}\right) \right]^{-1/2} \quad (\text{F.3})$$

Où  $C_1^*$ ,  $C_2^*$  et  $A_d$  désignent des constantes matériau.

La distribution des valeurs de  $\sigma_d$  suit une loi de Weibull, ce qui permet d'introduire un caractère probabiliste dans le modèle. La probabilité de trouver une particule de résistance inférieure ou égale à  $\sigma_d$  est donnée par la relation :

$$P(\sigma_d) = 1 - \exp\left[-\left(\frac{\sigma_d}{\tilde{\sigma}_d}\right)^\eta\right] \quad (\text{F.4})$$

Le paramètre  $\tilde{\sigma}_d$  représente la contrainte de normalisation et  $\eta$  l'exposant de Weibull.

Dans le volume élémentaire ( $i$ ), notons  $\sigma_{nuc}^i$  la contrainte définie par :

$$\sigma_{nuc}^i = \sigma_I^i + m_{T\varepsilon}^i(\sigma_{eq}^i - \sigma_Y^i) \quad (\text{F.5})$$

Dès lors que  $\sigma_{nuc}^i = \sigma_d$ , alors la condition de nucléation (F.1) est vérifiée dans le maillon ( $i$ ). Sachant que la condition de propagation (F.2) doit elle aussi être vérifiée, la probabilité de rupture dans un volume élémentaire s'exprime finalement :

$$P_{R0}^i = 1 - \exp\left[-\left(\frac{\sigma_{nuc}^i}{\tilde{\sigma}_d}\right)^\eta\right] \quad \text{si} \quad \sigma_l^i \geq S_C(\varepsilon_p^i) \quad (\text{F.6})$$

$$P_{R0}^i = 0 \quad \text{sinon} \quad (\text{F.7})$$

Par une approche de type maillon le plus faible, la probabilité de rupture dans un volume constitué de  $k$  volumes élémentaires.

$$P_R = 1 - \exp\left[-\frac{I}{(\tilde{\sigma}_d^i)^\eta} \sum_{i=1}^k (\tilde{\sigma}_{nuc}^i)^\eta\right] \quad (\text{F.8})$$

Pour tous les volumes élémentaires ne vérifiant pas la condition  $\sigma_l^i \geq S_C(\varepsilon_p^i)$ , on prend  $\sigma_{nuc}^i = 0$ .

### F.1.b Le modèle de Kroon, Faleskog et Örberg

Ce modèle fait également intervenir deux mécanismes fondamentaux pour prédire l'amorçage du clivage : la nucléation des micro-défauts sur des précipités et la propagation instable sous l'effet d'une contrainte critique. Les auteurs utilisent également la théorie du maillon le plus faible tout en introduisant un caractère non local dans le mécanisme de propagation instable. La probabilité élémentaire de rompre un volume  $dV$  s'exprime :

$$dP_R = h(\varepsilon_{eq}^p, \sigma_l) \frac{dV}{V_0} \quad (\text{F.9})$$

La fonction  $h$  est le produit de deux composantes  $h_1$  et  $h_2$ , qui correspondent respectivement aux contributions à la rupture des phénomènes de nucléation et de propagation des microdéfauts :

$$h(\varepsilon_{eq}^p, \sigma_l) = h_1(\varepsilon_{eq}^p) h_2(\sigma_l) \quad (\text{F.10})$$

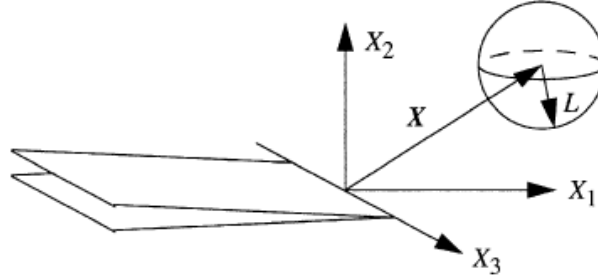
La fonction  $h_1$  dépend essentiellement de la déformation plastique équivalente :

$$h_1(\varepsilon_{eq}^p, \sigma_l) = c \varepsilon_{eq}^p \quad (\text{F.11})$$

Le paramètre  $c$  est toutefois fonction de la température. Le terme  $h_2$  est fonction de  $\bar{\sigma}_l$  qui désigne un indicateur de contrainte non local :

$$h_2(\varepsilon_{eq}^p, \sigma_1) = \exp \left[ - \left( \frac{\eta \sigma_{th}}{\bar{\sigma}_1} \right)^2 \right] - \exp(-\eta^2) \quad (\text{F.12})$$

$\sigma_{th}$  et  $\eta$  étant des paramètres matériau.



**Fig. F.1** : Introduction d'une grandeur non locale pour le calcul d'une contrainte principale moyennée  $\bar{\sigma}_1$

L'indicateur de contrainte  $\bar{\sigma}_1$  est défini comme étant la moyenne de la plus grande contrainte principale dans une sphère de rayon  $L$  (cf. figure F.1):

$$\bar{\sigma}_1(X) = \frac{1}{V_L} \int_{V_L} \sigma_1(X - \hat{X}) d\hat{V} \quad (\text{F.13})$$

$L$  est également un paramètre matériau comparable au volume élémentaire  $V_0$  dans le modèle de Beremin.  $X$  désigne la distance du centre de la sphère par rapport à la pointe de fissure. En intégrant l'équation (F.11), la probabilité de rupture  $P_R$  dans le volume  $V$  s'écrit :

$$P_R = 1 - \exp \left( - \int_V \text{Max}_t \left[ h(\varepsilon_{eq}^p(X), \bar{\sigma}_1(X)) \right] \frac{dV}{V_0} \right) \quad (\text{F.14})$$

Pour le calcul de  $P_R$ , il faut prendre en compte le maximum de la fonction  $h$  au cours du chargement. Ce modèle a été appliqué à un acier de cuve A508 et il est en accord avec les données expérimentales obtenues à partir des essais Charpy. Le paramètre non local  $L$  peut être considéré comme constant quel que soit l'essai modélisé, tandis que les constantes matériau  $\sigma_{th}$  et  $\eta$  dépendent de  $T$ .

### F.1.c Le modèle EOH

Ce modèle est une extension du modèle Ortner-Hippesley [ORT96]. Il s'appuie également sur la théorie du maillon le plus faible. Pour déclencher, le clivage, il faut à la fois vérifier une condition de nucléation de défauts et de propagation du défaut.

La nucléation des micro-défauts est ici supposée résulter de la rupture des carbures au cours de la déformation. Il y a rupture des carbures si ceux-ci sont déformés élastiquement au delà d'une valeur critique :



$$\varepsilon_{particle}^e \geq \varepsilon_{particle_{min}}^e \quad (F.15)$$

$$\varepsilon_{particle}^e = \varepsilon_{matrix}^e + \varepsilon_{matrix}^p = \frac{\sigma_{11matrix}}{E_{matrix}} + \varepsilon_{matrix}^p \quad (F.16)$$

La condition de propagation instable est donnée par le critère de Griffith. Le défaut se propage si sa taille est supérieure à une valeur critique  $r_0$  :

$$r_0 = \frac{2 E \gamma_{eff}}{\pi (1 - \nu^2) \sigma_{11matrix}^2} \quad (F.17)$$

Il est alors possible de calculer la probabilité de propagation  $P(r > r_0)$  en introduisant une distribution des tailles critiques de défauts, par exemple celle proposée par Ortner *et al.* [ORT05] :

$$P(r > r_0) = 1 - \exp \left[ - \left( \frac{r_0}{0.036} \right)^{-2.7} \right] \quad (F.18)$$

La probabilité de rupture cumulée s'écrit en fonction de la distance  $X$  par rapport au front de fissure :

$$P_R = 1 - \prod_{X=0}^X \left[ \left( 1 - P(r \geq r_0) \right) \left( 1 - P \left( \varepsilon_{particle}^e \geq \varepsilon_{particle_{min}}^e \right) \right) \right] \quad (F.19)$$

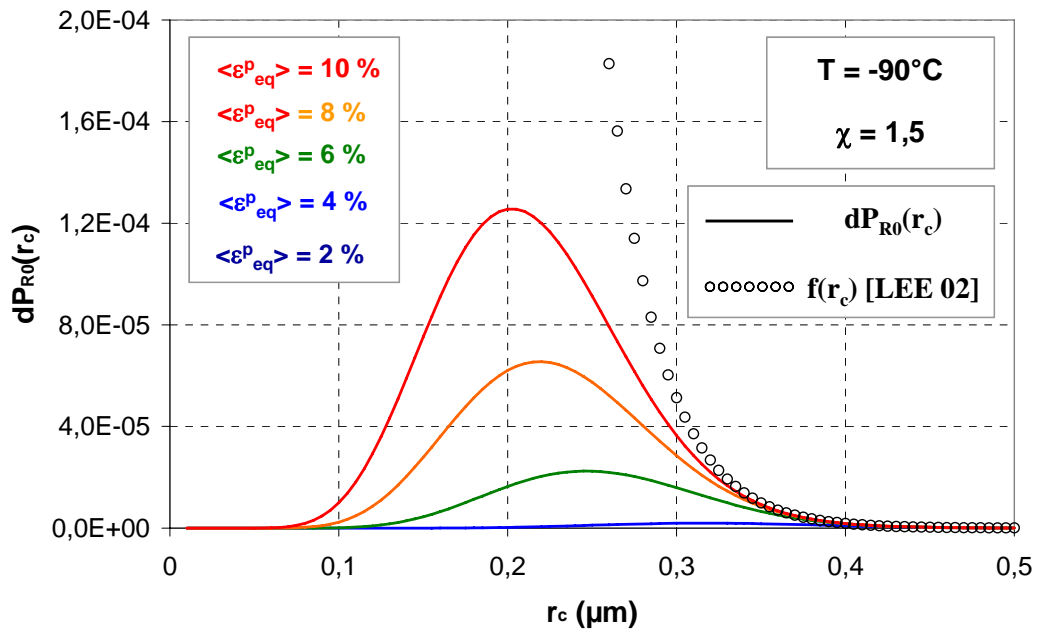
## F.2 Critère d'amorçage du clivage prenant en compte les défauts et les hétérogénéités de champs mécaniques

Cette partie présente quelques résultats complémentaires de ceux présentés dans le paragraphe D.3 du chapitre VI.

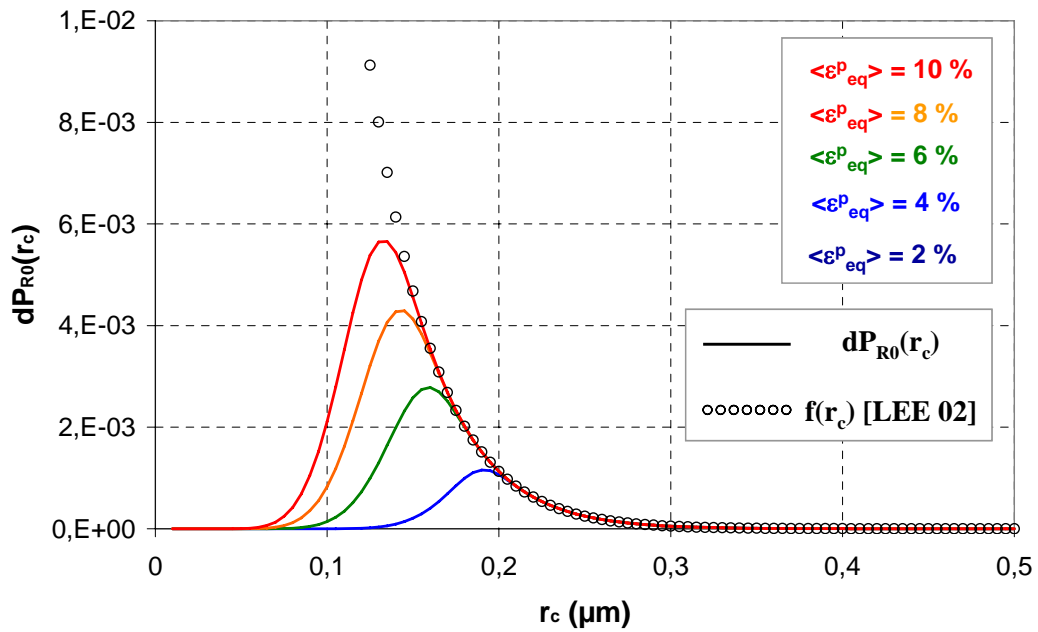
### F.2.a Etude à $\langle \mathcal{E}_{eq}^p \rangle$ fixée : évolution de la fonction $dPR_0 = f(r_c)$ en fonction de $T$ et $\chi$

#### a) Courbes $dPR_0 = f(r_c)$

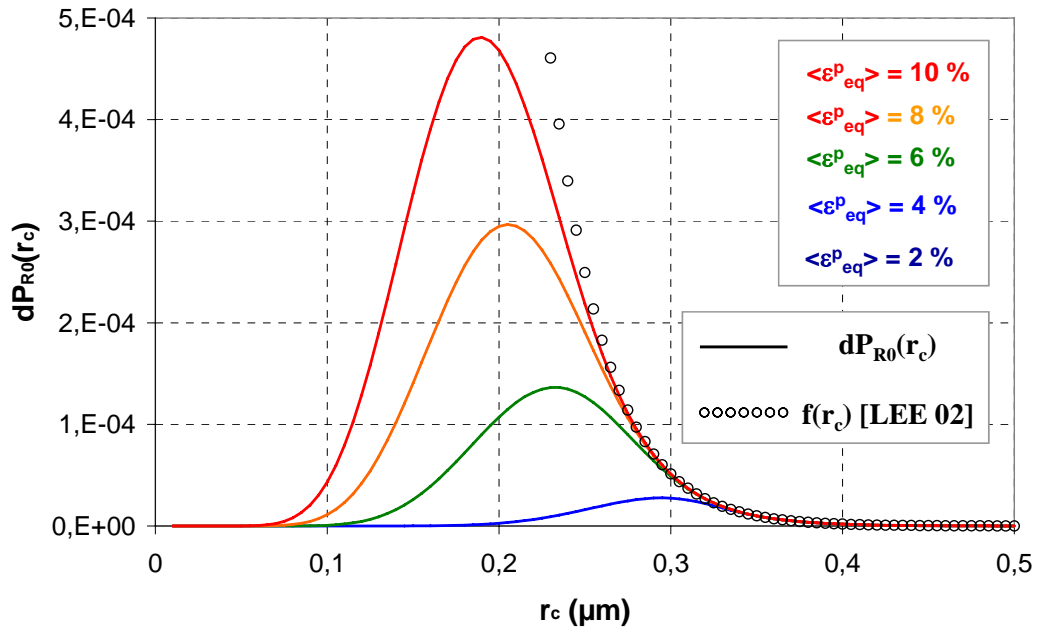
Les courbes  $dPR_0 = f(r_c)$  sont déjà données à  $T = -60^\circ\text{C}$  et  $-196^\circ\text{C}$  /  $c = 1,5$  et  $2,5$  dans le chapitre VI.



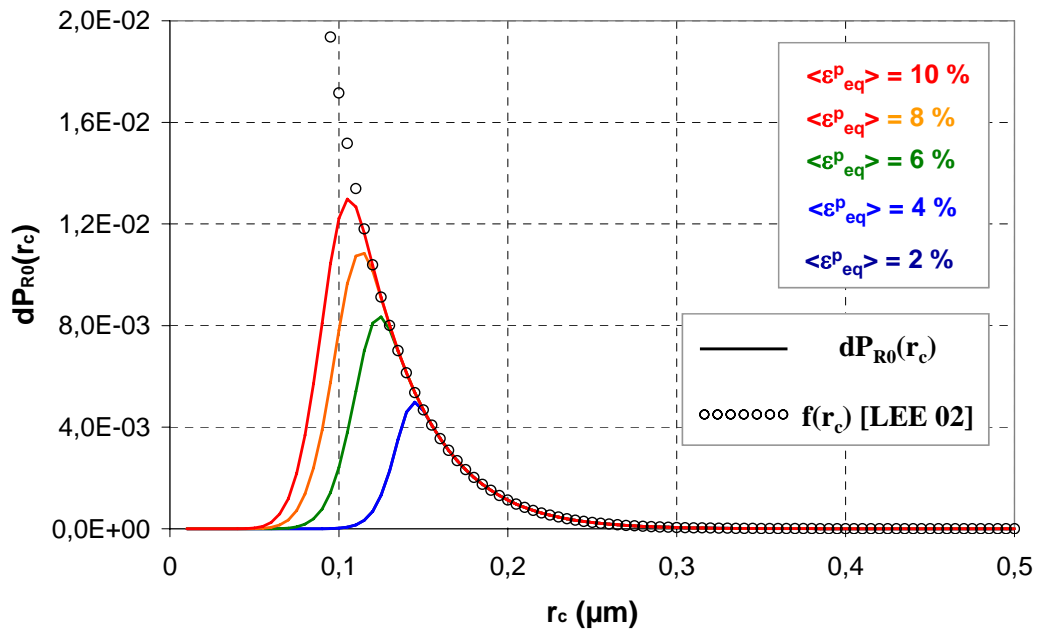
**Fig. F.2 :** Evolution de  $dP_{R0}(r_c)$  en fonction de  $\langle \varepsilon_{eq}^p \rangle$  pour  $\{T = -90^\circ\text{C}, \chi = 1,5\}$  et comparaison avec la fonction de distribution de tailles de carbures  $f(r_c)$



**Fig. F.3 :** Evolution de  $dP_{R0}(r_c)$  en fonction de  $\langle \varepsilon_{eq}^p \rangle$  pour  $\{T = -90^\circ\text{C}, \chi = 3,5\}$  et comparaison avec la fonction de distribution de tailles de carbures  $f(r_c)$



**Fig. F.4 :** Evolution de  $dP_{R0}(r_c)$  en fonction de  $\langle \varepsilon^p_{eq} \rangle$  pour  $\{T = -150^\circ\text{C}, \chi = 1,5\}$  et comparaison avec la fonction de distribution de tailles de carbures  $f(r_c)$



**Fig. F.5 :** Evolution de  $dP_{R0}(r_c)$  en fonction de  $\langle \varepsilon^p_{eq} \rangle$  pour  $T = -150^\circ\text{C}$  et  $\chi = 2,5$  / comparaison avec la fonction de distribution de tailles de carbures  $f(r_c)$

b) Evolution de la probabilité de rupture du maillon  $P_{R0}$  en fonction de  $\langle \varepsilon_p^{eq} \rangle$ 

Le tableau F.1 récapitule l'ensemble des valeurs de  $P_{R0}$  calculées par intégration des courbes  $dP_{R0} = f(r_c)$  pour  $T = -60^\circ\text{C}$ ,  $-90^\circ\text{C}$ ,  $-150^\circ\text{C}$  et  $-196^\circ\text{C}$  et  $\chi = 1,5$ ,  $2,5$ .

	$\langle \varepsilon_p^{eq} \rangle = 2\%$	$\langle \varepsilon_p^{eq} \rangle = 4\%$	$\langle \varepsilon_p^{eq} \rangle = 6\%$	$\langle \varepsilon_p^{eq} \rangle = 8\%$	$\langle \varepsilon_p^{eq} \rangle = 10\%$
$T = -60^\circ\text{C}$ $\chi = 1,5$	$7,54 \cdot 10^{-5}$	$6,00 \cdot 10^{-4}$	$1,56 \cdot 10^{-3}$	$2,79 \cdot 10^{-3}$	$4,19 \cdot 10^{-3}$
$T = -60^\circ\text{C}$ $\chi = 2,5$	$1,24 \cdot 10^{-2}$	$3,26 \cdot 10^{-2}$	$5,17 \cdot 10^{-2}$	$6,88 \cdot 10^{-2}$	$8,42 \cdot 10^{-2}$
$T = -90^\circ\text{C}$ $\chi = 1,5$	$6,36 \cdot 10^{-5}$	$6,80 \cdot 10^{-4}$	$1,89 \cdot 10^{-3}$	$3,50 \cdot 10^{-3}$	$5,38 \cdot 10^{-3}$
$T = -90^\circ\text{C}$ $\chi = 2,5$	$1,57 \cdot 10^{-2}$	$4,05 \cdot 10^{-2}$	$6,34 \cdot 10^{-2}$	$8,38 \cdot 10^{-2}$	$1,02 \cdot 10^{-1}$
$T = -150^\circ\text{C}$ $\chi = 1,5$	$5,82 \cdot 10^{-4}$	$3,22 \cdot 10^{-3}$	$7,00 \cdot 10^{-3}$	$1,12 \cdot 10^{-2}$	$1,56 \cdot 10^{-2}$
$T = -150^\circ\text{C}$ $\chi = 2,5$	$5,29 \cdot 10^{-2}$	$9,93 \cdot 10^{-2}$	$1,35 \cdot 10^{-1}$	$1,63 \cdot 10^{-1}$	$1,86 \cdot 10^{-1}$
$T = -196^\circ\text{C}$ $\chi = 1,5$	$1,48 \cdot 10^{-2}$	$3,14 \cdot 10^{-2}$	$4,54 \cdot 10^{-2}$	$5,75 \cdot 10^{-2}$	$6,80 \cdot 10^{-2}$
$T = -196^\circ\text{C}$ $\chi = 2,5$	$2,04 \cdot 10^{-1}$	$2,71 \cdot 10^{-1}$	$3,13 \cdot 10^{-1}$	$3,43 \cdot 10^{-1}$	$3,67 \cdot 10^{-1}$

**Tableau F.1 :** Evolution de  $P_{R0}$  en fonction  $\langle \varepsilon_p^{eq} \rangle$  pour  $T = -60^\circ\text{C}$ ,  $-90^\circ\text{C}$ ,  $-150^\circ\text{C}$  et  $-196^\circ\text{C}$  /  $\chi = 1,5$  et  $2,5$