HAL
open science

Plasticité cristaline des aciers sphéroïdisés et clivage

Saeid Rezaee

To cite this version:

Saeid Rezaee. Plasticité cristaline des aciers sphéroïdisés et clivage. Autre. Ecole Centrale Paris, 2011. Français. NNT : 2011ECAP0038 . tel-00664414

HAL Id: tel-00664414

https://theses.hal.science/tel-00664414v1

Submitted on 30 Jan 2012

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

Saeid REZAEE

pour l'obtention du

GRADE DE DOCTEUR

Spécialité : Mécanique & Matériaux

Laboratoire d'accueil : MSSMat

SUJET :

Plasticité cristalline des aciers sphéroïdisés et clivage

Thèse soutenue publiquement le 3 Octobre 2011

devant un jury composé de :

J. BESSON	**Rapporteur**
I. GUILLOT	**Rapporteur**
B. MARINI	**Examinateur**
C. REY	**présidente**
C. BERDIN	**Directrice de thèse**

2011-ECAP0038

A mes parents

Ce travail n'aurait pu aboutir sans le concours et l'aide de nombreuses personnes auxquelles je tiens à exprimer mes vifs remerciements.

Je souhaite tout d'abord remercier ma directrice de thèse madame Clotilde BERDIN qui m'a proposé ce sujet et qui m'a donné l'opportunité de réaliser ce travail au sein du laboratoire MSSMat de l'Ecole Centrale Paris. Je lui suis reconnaissant pour son encadrement et sa grande disponibilité. Sa rigueur et son professionnalisme m'ont apporté beaucoup de qualités qui m'accompagneront tout au long de ma carrière.

Je tiens à remercier tous les membres du jury. Je remercie madame Colette Rey d'avoir présidé le jury de thèse, messieurs Jacques Besson et Ivan Guillot d'avoir accepté de rapporter sur mon manuscrit de thèse et monsieur Bernard Marini d'avoir donné son temps pour participer au jury.

Je remercie Nicolas ROUBIER, Sylviane BOURGEOIS, Sokona KONATE, Thomas REISS, Françoise GARNIER et Eric PERRIN pour leurs contributions à la partie expérimentale et leurs disponibilités.

Je remercie également tous les membres du laboratoire MSSMAT de l'Ecole Centrale Paris pour leur gentillesse.

Je pense aussi à tous les thésards du laboratoire que j'ai côtoyés pendant toutes ces années de thèse. Tout d'abord mes pensées vont envers Julien SCHWARTZ que je tiens à remercier pour tous les bons moments passés ensemble. Je le remercie notamment de m'avoir indiqué le chemin le plus court pour arriver chez moi. Cela m'a fait gagner une minute par jour que j'ai bien sûr consacré à ma thèse. Je n'oublierai pas toutes les explorations que l'on a faites ensemble. Enfin il faudra un jour peut-être penser à publier toutes les études expérimentales que l'on a réalisées !

Je tiens à remercier Juien DEJAGER alias Julien 3. Malheureusement à son arrivée, nous étions déjà en fin de thèse et nous n'avons pas pu avoir beaucoup d'échanges en dehors du labo. Malgré cela, on a passé des moments très agréables (surtout avec le MEB du premier étage et les gants bleus).

Je remercie aussi Huaidong WANG pour tous les bons souvenirs au laboratoire ou aux conférences et séminaires. Je remercie Anne DEVULDER pour les moments agréables qu'on a passés ensemble. Je pense aussi à Guillaume PUEL pour sa grande gentillesse.

Je remercie tous mes amis et leurs soutiens et je pense à Bahram, Bahman, Mohammad, Behrouz, Sylvère, Mickael et Filipe.

Je tiens à remercier tout particulièrement Neda qui a su me donner les motivations pour continuer la thèse et aller jusqu'au bout de ce travail. J'aimerai souligner sa gentillesse, sa compréhension et son grand soutien.

Enfin je pense fortement à mes parents …

RESUME

En français :

La prédiction du clivage des aciers ferritiques a été largement étudiée à l'aide de l'approche locale de la rupture, et des modèles macroscopiques identifiés phénoménologiquement comme celui de Beremin. Cette prédiction reste cependant difficile dans le domaine de transition ductile-fragile. Cela a conduit à des études micromécaniques par les approches polycristallines afin de décrire l'évolution de la contrainte de clivage en fonction de la température pour les aciers bainitiques. Dans cette étude, on utilise une approche polycristalline, puis on développe un modèle macroscopique de prédiction du clivage d'un acier de microstructure plus simple, un acier sphéroïdisé. De nombreux résultats de la littérature indiquent que leur rupture est due à la microfissuration des carbures.

Le comportement mécanique et la rupture d'un acier sphéroïdisé C35R sont obtenus par des essais de traction simple et de ténacité dans une gamme de température entre -196 et 20°C. Les analyses microstructurales sont effectuées pour déterminer la distribution de taille des grains et des carbures.

Des modélisations simplifiées de la microstructure de l'acier sont proposées. L'aspect polycristallin du matériau est pris en compte. Une étude paramétrique concernant la distribution des contraintes dans les carbures est réalisée. On montre que les paramètres du modèle polycristallin n'influencent pas cette distribution à la condition de représenter le même comportement global en traction.

La prédiction de la rupture par clivage est basée sur une approche probabiliste, considérant la dispersion des contraintes dans les carbures due à l'hétérogénéité des champs mécaniques issue de la modélisation polycristalline. La probabilité élémentaire de rupture des carbures est ainsi obtenue. Différents modèles de rupture macroscopiques sont alors développés, basés sur des critères en germination et propagation des microfissures. Ils sont appliqués à une éprouvette SENT afin de prédire la ténacité dans le bas de la transition ductile-fragile. La comparaison avec les résultats expérimentaux montre que l'on doit prendre en compte l'évolution de la densité volumique des microfissures avec le chargement, l'extension des microfissures de taille variable ou leur émoussement. L'importance des différents critères dépend de la température.

En Anglais :

The cleavage fracture prediction of the ferritic steels has been widely studied using the local approach to fracture and macroscopic phenomenological models like Beremin. This prediction remains difficult in the ductile-brittle transition domain. Therefore, micromechanical studies have been carried out using polycrystalline approaches to describe the evolution of the cleavage stress in function of temperature for the bainitic steels. In this study, a macroscopic model using a polycrystalline approach is developed to predict the cleavage of one steel with a simple

microstructure: a spheroidized steel. Many results in the literature indicate that its fracture is due to carbide microcracking.

The mechanical and fracture behavior of a spheroidized steel C35R are obtained by tensile and toughness tests in a temperature range between -196°C and 20°C. The microstructural analyses are performed to determine the grain and carbide size distribution.

Simplified microstructure models of the steel are proposed. The polycrystalline aspect of the material is taken into account. A parametric study on the carbide stress distribution is carried out. It is shown that the parameters of the polycrystalline model do not influence the carbide stress distribution if the same global tensile behavior is represented.

The cleavage fracture prediction is based on the probabilistic approach, considering the stress scatter in the carbides due to the mechanical fields' heterogeneity related to the polycrystalline modelling. Thus, the elementary fracture probability function is obtained. Different macroscopic fracture models are then developed based on the criteria based on nucleation and propagation of microcracks. The models are applied to a SENT specimen to predict the toughness in the bottom of the ductile-brittle transition domain. The comparison with experimental results shows that the evolution of the microcracks volume density with the loading, the extension of the microcracks with various sizes or their blunting, must be taken into account. The importance of the different criterions depends on the temperature.

CHAPITRE I. INTRODUCTION GENERALE 7

I.1 CONTEXTE 8

I.2 OBJECTIF 9

I.3 DEMARCHE PROPOSEE 10

CHAPITRE II. ETUDE BIBLIOGRAPHIQUE 11

II.1 INTRODUCTION 12

II.2 RUPTURE DES ACIERS PAR CLIVAGE 12

II.2.1 Mécanismes élémentaires 12

II.2.2 Observations des mécanismes de base et discussion 14

II.3 PREDICTION DE LA RUPTURE : APPROCHES LOCALES MACROSCOPIQUES 19

II.3.1 Modèle RKR 19

II.3.2 Modèle de Weibull-Beremin 20

II.3.3 Application de l'approche probabiliste à la transition ductile-fragile 23

II.4 DISCUSSION SUR LES APPROCHES LOCALES MACROSCOPIQUES 25

II.4.1 Relation microstructure-rupture 25

II.4.2 Etats mécaniques et site de rupture 27

II.4.3 Critères locaux macroscopiques 32

II.5 APPROCHES POLYCRISTALLINES DE LA RUPTURE FRAGILE 37

II.5.1 Généralités sur les modèles polycristallins 38

II.5.2 Modèle CristalECP 38

II.5.3 Application au clivage 40

II.6 CONCLUSION PARTIELLE 46

CHAPITRE III. CARACTERISATION MICROSTRUCTURALE ET MECANIQUE DU MATERIAU 49

III.1 INTRODUCTION 50

III.2 MICROSTRUCTURE DU MATERIAU 50

III.2.1 Matériau 50

III.2.2 Traitement thermique 51

III.2.3 Analyse microstructurale 52

III.3 CARACTERISATION MECANIQUE 55

III.3.1 Introduction *55*

III.3.2 Essais de traction simple *55*

III.3.3 Essais SENT *59*

III.4 FRACTOGRAPHIE 65

III.4.1 Observations *65*

III.4.2 Etat mécanique au site d'amorçage *69*

III.5 CONCLUSION PARTIELLE 70

CHAPITRE IV. SIMULATIONS DE MICROSTRUCTURE 73

IV.1 INTRODUCTION 74

IV.2 GENERATION DE MICROSTRUCTURE 74

IV.2.1 Géométrie *74*

IV.2.2 Génération des orientations cristallines *77*

IV.3 ETUDE PARAMETRIQUE 79

IV.3.1 Introduction *79*

IV.3.2 Maillage et conditions aux limites *79*

IV.3.3 Comportements mécaniques *80*

IV.4 RESULTATS DE L'ETUDE PARAMETRIQUE 81

IV.4.1 Hétérogénéité due à l'échelle cristalline *81*

IV.4.2 Influence de la distribution d'orientation cristalline des grains *87*

IV.4.3 Influence de la répartition spatiale des carbures *94*

IV.4.4 Influence de la taille des carbures *96*

IV.4.5 Influence de la morphologie des grains *97*

IV.5 APPLICATION A L'ACIER C35R 98

IV.5.1 Introduction *98*

IV.5.2 Paramètres indépendants de la température *99*

IV.5.3 Evolution de la cission critique *99*

IV.5.4 Paramètres de la loi d'évolution de la densité de dislocations *100*

IV.5.5 Agrégat pseudo-polycristallin *101*

IV.5.6 Résultats des identifications *102*

IV.6 CONCLUSION PARTIELLE 104

CHAPITRE V. MODELES PROBABILISTES DE LA RUPTURE PAR CLIVAGE 107

V.1 INTRODUCTION 108

V.2 EFFET DE LA TEMPERATURE SUR LA DISTRIBUTION DES CONTRAINTES DANS LES CARBURES 108

V.2.1 Influence de la température sur l'hétérogénéité des champs mécaniques 108

V.2.2 Fonction de distribution des contraintes dans les carbures 112

V.3 PROBABILITE ELEMENTAIRE DE MICROFISSURATION 115

V.3.1 Distribution spatiale des carbures 115

V.3.2 Influence de la contrainte critique 117

V.4 PROBABLITE DE RUPTURE PILOTEE PAR LA GERMINATION 118

V.4.1 Démarche 118

V.4.2 Prédiction de la ténacité 119

V.5 PROBABILITE DE RUPTURE PILOTEE PAR LA PROPAGATION 121

V.5.1 Critère de Griffith 121

V.5.2 Influence de la distribution de taille des carbures 124

V.5.3 Influence de la fraction des carbures fissurés et émoussés 131

V.6 CONCLUSION PARTIELLE 135

ANNEXES 137

CONCLUSION GENERALE ET PERSPECTIVES 149

CHAPITRE I.
INTRODUCTION GENERALE

I.1 CONTEXTE……..….8

I.2 OBJECTIF……9

I.3 DEMARCHE…….10

I.1 CONTEXTE

L'étude de la rupture des matériaux est importante pour les structures de sécurité et dans le cadre de la tolérance au dommage, lorsque l'on accepte la présence d'une fissure dans une structure. Ainsi, la rupture des métaux a été largement étudiée. On trouve deux grands types d'approches : l'approche « globale » et l'approche « locale ». Dans l'approche globale, il n'y a souvent qu'un ou deux paramètres pour définir la résistance à la rupture, et les micro-mécanismes d'endommagement et de rupture ne sont pas pris en compte. Les qualités prédictives de cette approche sont limitées aux cas où il pré-existe une macrofissure, lorsqu'il n'y a pas trop d'effet de géométrie pouvant affecter le volume sollicité ou le type de chargement. L'approche locale est une approche souvent macroscopique : on suppose que la rupture aura lieu quand une condition critique locale macroscopique sera atteinte. Cette condition est souvent exprimée en terme de contraintes ou de déformations. Si la condition critique est écrite à partir de considérations micromécaniques, cette approche est indépendante du type de chargement, et les paramètres qui peuvent apparaître et ne dépendent que du matériau. On doit pouvoir prédire la ténacité des matériaux à l'aide de cette approche sans avoir recours à la mesure, mais surtout on doit pouvoir prédire directement la tenue d'un composant mécanique comportant ou non une fissure.

La rupture des alliages métalliques est souvent due aux particules dures présentes dans une matrice plastique. L'endommagement et la rupture peuvent avoir lieu par germination d'une micro-fissure dans ces particules et sa propagation rapide dans la matrice plastique (rupture fragile) ou par décohésion des particules pour créer des cavités qui, par croissance et coalescence, conduisent à la rupture ductile. Dans les aciers ferritiques, il y a un domaine de température (en relation avec un domaine de vitesse de sollicitation) de transition de rupture : la transition ductile-fragile. Dans ce domaine, la rupture fragile est précédée par l'amorçage et la propagation d'une déchirure ductile. On s'intéresse à la prédiction de la rupture des aciers dans ce domaine.

Avec les approches locales, on peut prédire la rupture fragile sur le palier bas de la transition ductile-fragile par le modèle RKR (Ritchie et al., 1973) ou par des modèles probabilistes comme le modèle de Beremin (1983). La rupture ductile sur le palier haut peut être prédite avec les modèles dérivés de celui de Gurson (1977), le modèle GTN (Needleman et Tvergaard, 1984) par exemple.

Rossoll (1998) entre autres, a étudié la rupture dans le bas de la transition ductile-fragile d'un acier bainitique faiblement allié, par des essais Charpy et des essais de ténacité. Il a utilisé le modèle GTN pour modéliser la rupture ductile qui précède la rupture fragile, puis il a appliqué le modèle de Beremin identifié sur le palier bas de la transition pour prédire la rupture fragile. Il a pris en compte l'évolution du comportement mécanique avec la vitesse de déformation et avec la température. Il a montré qu'une telle modélisation permettait de rendre compte des mesures de résilience et des mesures de ténacité pour le bas de la transition. Cependant, la résistance à la rupture pour les températures plus élevées est sous-estimée. Cette étude a été confirmée par celle de Tanguy (2001). Bernauer et al. (1999) a également couplé les deux modèles GTN et Beremin

pour modéliser la rupture dans le domaine de transition ductile-fragile d'un acier du même type que ceux étudiés par Rossoll et Tanguy. Ils ont pris en compte la diminution de population des défauts initiateurs de la rupture fragile due à la germination des cavités sur les carbures. Haušild et al. (2005) ont aussi modifié le modèle de Beremin et introduit une dépendance de la température pour les paramètres de Weibull. Ils ont prédit la ténacité par les essais Charpy. Tanguy et al. (2005) ont utilisé le modèle de Rousselier (1987) pour modéliser la partie ductile et modifié le modèle Beremin pour prédire la rupture fragile dans le domaine de transition ductile-fragile. Ils ont aussi dû supposer que les paramètres de Beremin dépendent de la température.

Jusqu'à présent, aucune justification de ces modifications de distributions de rupture avec la température n'a été bien validée. Il semble que lorsque la température augmente, les mécanismes de clivage évoluent (Haušild et al., 2005). D'une manière générale, ces mécanismes font intervenir de la plasticité à l'échelle cristalline. C'est ainsi que certains auteurs ont proposé des modélisations de la rupture par clivage à cette échelle.

Mathieu (2006) a étudié la rupture d'un acier bainitique dans le bas du domaine ductile-fragile en utilisant un modèle cristallin. Libert (2007) a également étudié la rupture fragile d'un acier bainitique en prenant en compte des mécanismes locaux de déformation à l'échelle cristalline et la dispersion des contraintes à rupture. Ces deux auteurs ont proposé des modèles d'approche locale qui utilisent les distributions de tailles de carbures et les hétérogénéités de contrainte dans la microstructure dues aux hétérogénéités locales. Nguyen (2010) a récemment appliqué une démarche similaire. Dans ces études micromécaniques, des éléments concernant l'influence des hétérogénéités des champs à l'échelle cristalline sur la rupture d'un volume élémentaire ont été obtenus. L'application à la prédiction de la rupture d'une structure, en particulier d'une structure fissurée, reste à faire.

Par ailleurs, les mécanismes de rupture dans le domaine de la transition ductile-fragile ne sont pas clairement identifiés pour les aciers bainitiques et martensitiques. De plus, ces types d'aciers ont des microstructures complexes à modéliser et les carbures souvent évoqués comme origine de la rupture par clivage sont trop petits par rapport aux grains et rendent la modélisation difficile.

I.2 OBJECTIF

L'objectif de ce travail est de poursuivre les approches polycristallines pour la prédiction de la rupture fragile des aciers, mais en introduisant un matériau plus simple du point de la microstructure critique pour la rupture. Ainsi, un acier sphéroïdisé avec des grains de ferrite équiaxes et des carbures de forme sphéroïdale, est choisi. La prédiction sera basée sur des modèles micro-mécaniques en introduisant l'hétérogénéité cristalline de la matrice plastique et les carbures susceptibles de rompre seront représentés explicitement. Le passage de la modélisation à l'échelle microscopique à la prédiction de la rupture à l'échelle macroscopique sera réalisé à partir de ces calculs et des théories classiques issues de la littérature.

I.3 DEMARCHE PROPOSEE

Dans un premier temps, une synthèse bibliographique des mécanismes de rupture dans les aciers est présentée dans le chapitre II. Les mécanismes physiques classiquement proposés pour expliquer la rupture fragile sont rappelés, ainsi que les modèles d'approche locale qui permettent de rendre compte de ces mécanismes. Une discussion de ces modèles est proposée en regard des difficultés rencontrées pour la modélisation de l'augmentation brutale de la ténacité observée dans le domaine de transition.

Le chapitre III présente les résultats des caractérisations expérimentales sur un acier ferritique (C35R) comportant 0.35% massique de carbone. L'acier choisi, est soumis aux traitements thermiques afin d'obtenir une microstructure avec des grains ferritiques et des carbures (cémentite) sphériques. Des analyses microstructurales sont effectuées. Le comportement mécanique du matériau traité est identifié par des essais de traction dans une gamme de température entre -196°C et la température ambiante. Les essais sur les éprouvettes type SENT (Single Edge Notch Tension) sont réalisés afin de caractériser l'évolution de la ténacité dans une gamme de température entre -196°C et -40°C. Les études fractographiques permettent de déterminer les sites d'initiation de rupture ainsi que la nature de ces sites.

Le chapitre IV concerne des études numériques sur un matériau modèle avec des polycristaux de ferrite et des particules élastiques, des carbures de fer. Une loi cristalline est utilisée pour le comportement mécanique des grains. La loi cristalline utilisée est cristalECP. Une étude paramétrique est menée sur l'influence de différents paramètres géométriques sur le chargement d'un carbure et sur la distribution des contraintes dans les carbures. Enfin les paramètres du modèle cristallin (CristalECP) sont identifiés pour le C35R sur les essais de traction réalisés aux températures entre -196 et 20°C.

Le chapitre V expose les résultats des analyses polycristallines étendues à toutes les températures entre -196° et 20°C afin d'étudier l'influence de la température sur l'hétérogénéité des champs mécaniques dans la microstructure. En utilisant ces analyses, la distribution des contraintes moyennes dans les carbures est calculée à chaque de température. La formulation d'une équation de la probabilité élémentaire de germination d'une microfissure dans un carbure est proposée à l'aide des distributions des contraintes moyennes des carbures. A partir de cette formulation, différentes hypothèses sont formulées et des modèles probabilistes de rupture sont proposés pour rendre compte de l'augmentation brutale de ténacité avec la température.

CHAPITRE II.
ETUDE BIBLIOGRAPHIQUE

TABLE DES MATIERES

II.1 INTRODUCTION 12

II.2 RUPTURE DES ACIERS PAR CLIVAGE 12

II.2.1 Mécanismes élémentaires 12

II.2.2 Observations des mécanismes de base et discussion 14

II.3 PREDICTION DE LA RUPTURE : APPROCHES LOCALES MACROSCOPIQUES 19

II.3.1 Modèle RKR 19

II.3.2 Modèle de Weibull-Beremin 20

II.3.3 Application de l'approche probabiliste à la transition ductile-fragile 23

II.4 DISCUSSION SUR LES APPROCHES LOCALES MACROSCOPIQUES 25

II.4.1 Relation microstructure-rupture 25

II.4.2 Etats mécaniques et site de rupture 27

II.4.3 Critères locaux macroscopiques 32

II.5 APPROCHES POLYCRISTALLINES DE LA RUPTURE FRAGILE 37

II.5.1 Généralités sur les modèles polycristallins 38

II.5.2 Modèle CristalECP 38

II.5.3 Application au clivage 40

II.6 CONCLUSION PARTIELLE 46

II.1 INTRODUCTION

Ce chapitre est une étude bibliographique concernant la prédiction de la rupture fragile par clivage des aciers. On rappelle les mécanismes proposés classiquement pour expliquer le clivage dans les métaux du point de vue théorique, et la relation avec les observations dans des microstructures simples.

Les modèles macroscopiques locaux les plus classiques utilisés pour la prédiction de la rupture fragile des aciers sont rappelés, en particulier le modèle de Beremin. Les résultats de l'application de ce modèle à la prédiction de la transition ductile-fragile sont exposés. Ces résultats conduisent à une discussion concernant le choix de la microstructure critique et les critères macroscopiques locaux. Des modèles dérivés des approches classiques pour pallier les difficultés de prédiction de la rupture rencontrées avec le modèle de Beremin sont alors présentés.

Enfin, certains auteurs ont récemment proposé une approche micromécanique de la rupture par clivage, pour prendre en compte les hétérogénéités des champs mécaniques à l'échelle des grains. Ces modèles sont basés sur la plasticité cristalline dont nous présentons les lois, puis nous exposons les résultats obtenus pour la rupture par clivage.

II.2 RUPTURE DES ACIERS PAR CLIVAGE

Deux types de rupture peuvent apparaître dans les aciers ferritiques sous sollicitation monotone à température modérée (-196°C-300°C): la rupture ductile et la rupture fragile. La rupture ductile se produit dans le domaine des hautes températures et la rupture fragile se produit dans le domaine des basses températures. La rupture fragile est brutale et aléatoire. Elle nécessite peu d'énergie. Chaque type de rupture correspond à des mécanismes d'endommagement particuliers.

Il existe un domaine de transition ductile-fragile, lorsque la température évolue des basses températures vers les hautes températures : dans ce domaine, les deux mécanismes de rupture co-existent. En général, la rupture ductile précède la rupture fragile dont le déclenchement limite le niveau d'énergie nécessaire à la rupture (Haušild et al., 2002). La prédiction de la rupture fragile est un enjeu majeur pour les structures de sécurité. Nous nous intéressons ici à la rupture fragile par clivage.

II.2.1 Mécanismes élémentaires

La rupture par clivage des aciers se produit par séparation des plans cristallins essentiellement de type (001) pour les cubiques centrés ; des clivages selon des plans (112) ont également été observés (Haušild, 2005). Les métaux cubiques à faces centrées (C.F.C.) ne sont pas sensibles au clivage, car les dislocations sont suffisamment mobiles et les mécanismes de glissement suffisamment nombreux pour conduire à une rupture ductile. La différence de ces comportements à rupture est à relier avec l'évolution de la limite d'élasticité de ces matériaux en fonction de la température et à la transition de comportement observée dans les métaux C.C. (Andersson, 1994, François, Pineau et Zaoui,1991).

Des calculs élémentaires (rappelés par ex. dans Andersson, 1994) basés sur les liaisons interatomiques, permettent d'évaluer la contrainte théorique de clivage :

$$\sigma_{th} = \left(\frac{E\gamma_s}{d} \right)^{1/2} \approx \frac{E}{10} \qquad \text{(II.1)}$$

avec *E,* le module de Young, *d,* la distance entre 2 plans de clivage consécutifs et γ_s l'énergie de surface. Griffith en 1920 (Andersson, 1994) a montré que les contraintes de rupture mesurées dans des matériaux très fragiles, sont nettement inférieures à la contrainte théorique de clivage. Il a expliqué cette observation par l'existence de concentrations locales de contrainte provoquée par la présence dans le matériau, de défauts de type microfissure.

Griffith suppose donc que la rupture est due à la propagation instable d'un défaut. Cette extension aura lieu dés que l'énergie élastique dans la structure permettra la création de 2 nouvelles surfaces libres. Ce critère peut s'exprimer en contrainte : l'extension de la fissure aura lieu quand la contrainte macroscopique normale au plan de la fissure, atteint une contrainte critique, ou contrainte de clivage σ_f. Ainsi, la contrainte macroscopique critique pour un défaut sous forme de fissure traversante dans une plaque épaisse constituée d'un milieu élastique linéaire isotrope est :

$$\sigma_f = \sqrt{\frac{2E\gamma_p}{\pi(1-\nu^2)a_0}} \qquad \text{(II.2)}$$

avec *E* le module de Young, ν le coefficient de Poisson, γ_p l'énergie effective nécessaire pour la création d'une unité de surface, $2a_0$ la longueur de la fissure. Pour déterminer si la rupture aura lieu, il suffit donc de comparer la contrainte normale au plan de la microfissure à cette valeur critique. Si, pour une longueur donnée de microfissure, toutes les orientations sont possibles, on comparera la contrainte normale maximale, *i.e.* la contrainte principale maximale, à la contrainte critique de clivage.

Dans l'analyse initiale on a $\gamma_p=\gamma_s$, où γ_s est l'énergie de surface des plans de clivage. L'étude de la rupture par clivage du fer et de ses alliages a conduit à poser : $\gamma_p=\gamma_s+w_p$ où w_p est le travail plastique par unité de surface qui accompagne l'amorçage de la fissure. Cette énergie est normalement plus importante que γ_s. Curry et Knott (1978) trouvent γ_p =14 J.m^{-2} pour un acier sphéroïdisé alors que γ_s est estimé à 2 J.m^{-2}. Bowen at al. (1984) ont utilisé des valeurs de l'énergie de surface effective dans la ferrite entre 4.3 et 10 J.m^{-2} pour un acier A533B. Dans la littérature, cette valeur est déterminée en supposant une taille de défaut critique et en utilisant la contrainte principale maximale au lieu et à l'instant de la rupture (cette valeur est obtenue par un calcul analytique ou numérique). Dans les aciers bainitiques, les entités microstructurales évoquées pour la rupture sont nombreuses et conduisent à autant de valeurs d'énergie de rupture : Brozzo et al. (1978) montrent que le paquet de lattes bainitiques fissuré (de l'ordre de 10µm) est l'entité microstructurale contrôlant la rupture et calcule donc une énergie de surface effective de 120J.m^{-2}. En prenant les carbures fissurés comme entité à l'origine du clivage dans les aciers bainitiques, Saario et al. (1984) proposent une énergie de surface effective de 9 J.m^{-2} du même ordre de grandeur que celle calculée pour les aciers doux.

Wallin et al. (1984) proposent de faire varier w_p avec la température ; ce travail dépend de la mobilité des dislocations qui dépend de la température au travers de la force de Peierls-Nabarro. Ainsi, le travail plastique est inversement proportionnel à la force de Peierls-Nabarro. Les auteurs proposent l'expression suivante :

$$w_p\,(T)=w_0+[w_p(0)-w_0]e^{mT} \qquad \text{(II.3)}$$

où w_0 est la partie athermique de w_p, et m est l'exposant de la force de Peierls-Nabarro. Wallin et al. (1984) proposent des valeurs de 2.15, 3.92 et 0.0104 pour w_0, $w_p(0)$ et m respectivement.

Dans les matériaux céramiques, les microfissures qui fragilisent le matériau sont issues du procédé de fabrication, ou ce sont de défauts de surface créés lors de l'utilisation. Les défauts à l'origine du clivage dans les métaux se développent lors de la sollicitation à basse température.

Des travaux théoriques dans les années 1950 et 1960 ont eu pour objet d'expliquer la présence de ces germes de clivage. Ils sont basés sur la théorie des dislocations. Zener (1948) et Stroh (1954) proposent que la concentration des contraintes créée par un empilement de dislocations sur un obstacle dans le grain (une macle par exemple) ou un joint de grain, est suffisante pour la création d'une microfissure. Cottrell (1958) montre que l'interaction de deux systèmes de glissement, (101) $[\bar{1}\bar{1}1]$ et $(10\bar{1})$ [111], donne naissance à un microclivage dans le plan (001) qui peut s'étendre jusqu'au joint de grain. Des observations (voir paragraphe suivant) ont mis en évidence l'influence des carbures dans les aciers, même à faible taux de carbone. Ainsi, Smith (1966) a étudié la création d'un germe de clivage due à l'empilement de dislocations sur un carbure. On trouvera les détails de ces différents modèles dans (Andersson, 1994, François, Pineau et Zaoui, 1991). La création de fissures dans les carbures par un mécanisme de type « fiber loading » ne faisant pas intervenir la plasticité à l'échelle des dislocations, a été également proposé (voir paragraphe suivant).

Au final, on peut décomposer le mécanisme physique de rupture par clivage des métaux en trois étapes :

1. la création de « germe de clivage » dans un grain ou une particule,
2. l'extension de ce germe à la première barrière énergétique, un joint de grain ou l'interface grain/particule qui crée la microfissure,
3. la rupture finale par propagation instable de la microfissure de clivage créée au stade précédent.

Ainsi, la création des germes de clivage est pilotée par la déformation plastique que ce soit par la plasticité discrète (les empilement de dislocations) ou par la plasticité continue (« fiber loading »), alors que le dernière stade suivant dépendent de la contrainte principale maximale. La détermination du stade critique conditionnera le critère de rupture macroscopique.

II.2.2 Observations des mécanismes de base et discussion

McMahon et al. (1965) ont étudié la rupture par clivage d'aciers à 0.035 et 0.007% massique de carbone. Leurs observations montrent que les carbures se fissurent après quelques pourcents de déformation plastique de la ferrite. Ils observent une extension de ces microfissures dans le grain

de ferrite adjacent sauf si la ferrite se déforme autour du carbure fissuré. L'extension instable de cette microfissure provoque la rupture finale.

Ils concluent que 90 pourcents des microfissures ont pour origine les carbures : des observations après des polissages successifs montrent en effet souvent la présence d'un carbure fissuré, éventuellement en sous-couche (figure II-1). Les microfissures peuvent être arrêtées par les joints de grains, des maclages préexistants, ou par des bandes de glissement (figure II-2). Le maclage n'est pas à l'origine des microfissures car il se produit à très basse température et à très bas niveau de déformation. Le nombre de carbures fissurés augmente avec la déformation et diminue lorsque la température augmente. Les carbures les plus épais se fissurent plus facilement.

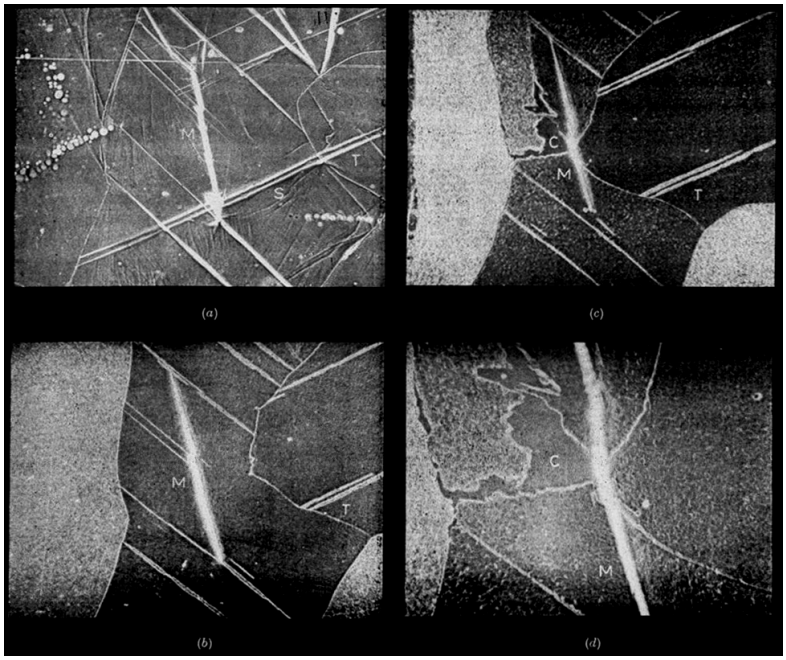


figure II-1: Micrographies d'un acier ferritique après la rupture à -180 ºC. M, T, C et S représentent la microfissure, le maclage, le carbure et la bande de glissement (a) la microfissure n'est pas connectée à un carbure (b) après polissage de la surface, les bandes de glissement disparaissent (c) (d) après un polissage complémentaire, un carbure lié à la microfissure apparaît. (McMahon et al.,1965)

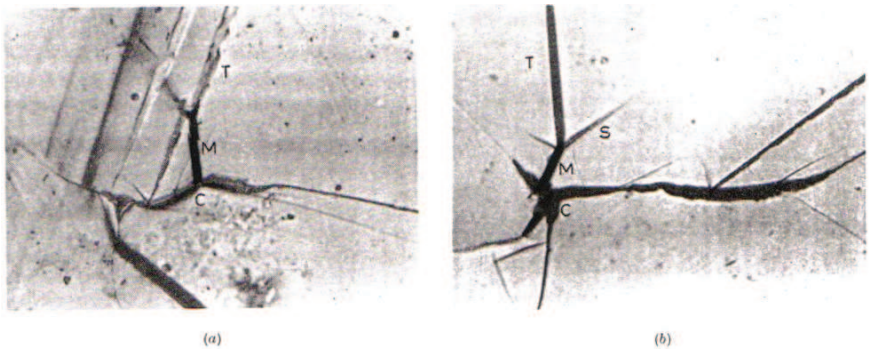


figure II-2 : Arrêt de microfissure dans un acier ferritique (a) Microfissure M créée dans un carbure C et arrêtée par un maclage T (b) Microfissure M créée dans un carbure C et arrêtée par l'intersection d'un maclage T et d'une bande de glissement S (McMahon et al.,1965)

Lindley et al. (1970) ont étudié la fissuration des carbures aux joints grains dans les aciers à bas carbone. Aux basses températures, quelques fissures dans les carbures s'étendent dans la matrice ferrtique. Certaines de ces microfissures s'arrêtent sur un obstacle, joint de grain ou macle, tandis que d'autres montrent une propagation limitée dans le grain ferritique avec une longueur de propagation proportionnelle à la taille du grain (figure II-3). Les auteurs observent des carbures multifissurés, et la densité de fissures augmente avec la déformation, mais diminue lorsque la température augmente (figure II-4). Ces résultats conduisent les auteurs à conclure que c'est le mécanisme de « fiber loading » qui intervient dans le chargement du carbure et sa fissuration ; les glissements et les maclages sont à l'origine de la fissuration des carbures uniquement à très basse température dans les tous premiers stades de la déformation. Ils évaluent la contrainte à rupture des films de cémentite entre 1.4 et 7 GPa. Ils avancent déjà l'idée que la rupture finale par clivage aura lieu si la déformation et la contrainte sont suffisantes pour créer une microfissure et la propager.

Gurland (1972) s'intéresse à la fissuration des carbures dans un acier sphéroïdisé sollicité en traction, en torsion et en compression. Il confirme la dépendance de la fissuration des carbures avec la déformation (figure II-5 (a)) observé par Lindley et al. (1970). Il observe que les fissures qui se forment dans les particules de carbure sphéroïdisé, sont perpendiculaires à la direction de déformation macroscopique la plus grande : en traction, c'est la direction de traction (figure II-5) ; en compression, les fissures sont parallèles à la direction de compression, donc perpendiculaires à la direction de plus grande déformation. Ce résultat est compatible avec le mécanisme de « fiber loading ». L'auteur évalue la contrainte à rupture d'un carbure sphéroïdisé à 700MPa. Cette valeur, plus faible que celle donnée par Lindley et al. (1970) peut s'expliquer par un volume plus important du carbure sphéroïdisé et un effet de volume sur la résistance de ces particules.

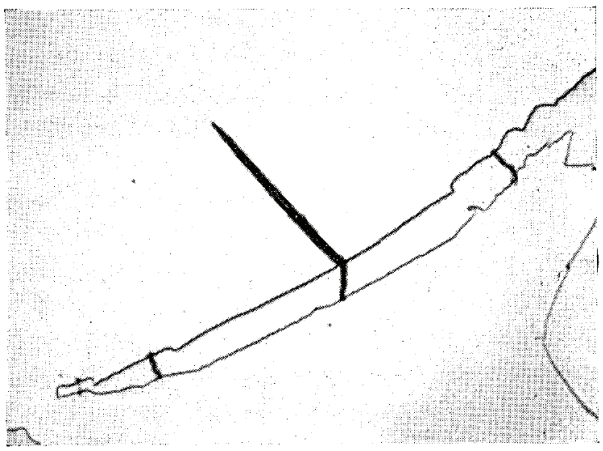


figure II-3. Propagation limitée de fissure d'un carbure dans un grain ferritique à -196°C (Lindley et al., 1970)

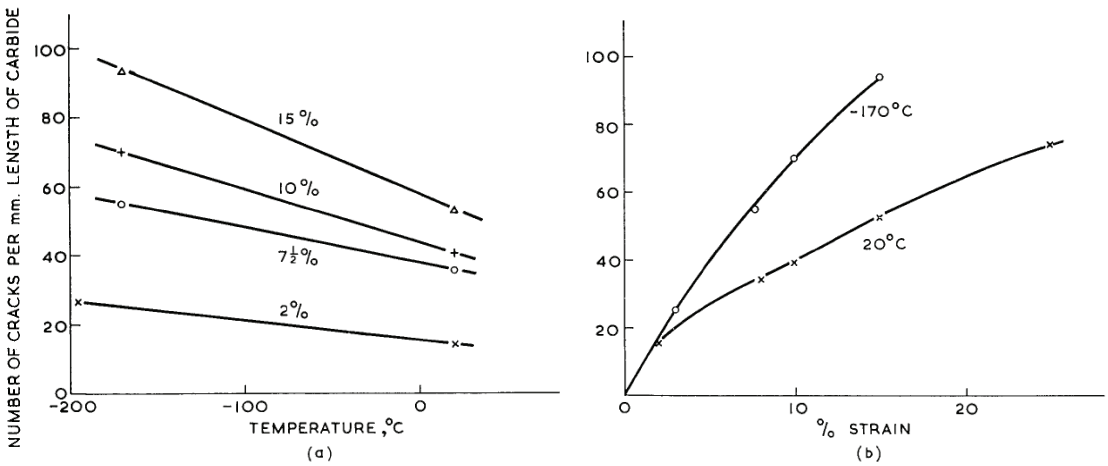
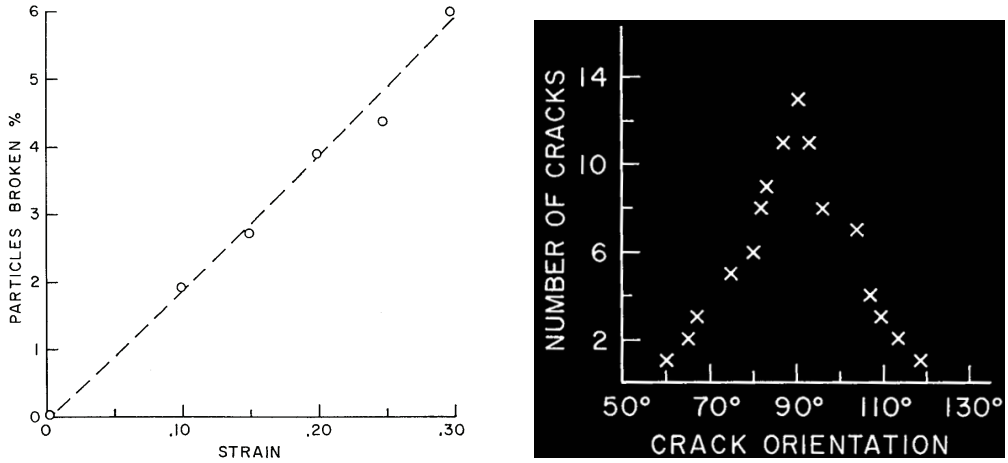


figure II-4. Nombre des fissure des carbure/ la taille des carbures, (a) en fonction de la température pour différents niveaux de déformation, (b) en fonction de la déformation à -170 et 20°C (Lindley et al., 1970)



(a) (b)

figure II-5. (a) Pourcentage des carbures fissurés en fonction de la déformation, (b) distribution des orientations des fissures par rapport à la direction de traction (Gurland, 1972)

Les carbures les plus gros sont plus facilement fissurés. Cette influence de la taille du carbure sur sa résistance peut être expliquée de différentes façons validant l'idée que les carbures rompent sous l'effet d'un empilement de dislocations ou par un chargement plus homogène. Plus le grain est gros, plus l'empilement de dislocations est long et la concentration de contrainte sévère en tête d'empilement ; si la taille des carbures est associée à la taille des grains, on peut expliquer la rupture précoce des carbures les plus gros. On peut également l'expliquer en rappelant que les carbures sont des matériaux fragiles bien connus pour l'effet de volume sur la rupture : plus le volume sollicité est important, plus la résistance est faible. Curry et Knott (1978) suivent la première voie ; ils modifient le modèle de Smith en introduisant la loi de Hall-Petch. Ils montrent ainsi que seule la taille de carbure intervient dans la contrainte de rupture par clivage. Pour expliquer les résultats expérimentaux indiquant que la contrainte critique (σ_f) dépend de la taille de grain, ils rappellent qu'il y a une relation entre la taille moyenne de grain et la taille moyenne de carbure dans les aciers doux, et que le rapport entre la taille du carbure et la taille de grain est approximativement constant.

Bowen et al. (1986) ont proposé que pour les microstructures ferritique, bainitique et martensitique, la rupture est contrôlée par la distribution des tailles des carbures. Ils ont montré à partir de résultats expérimentaux que la forme de carbure est aussi importante pour la rupture.

Petch (1986) a étudié théoriquement la germination des fissures dans les carbures situés dans les joints de grains des aciers doux. Il montre que les calculs statiques donnent une contrainte de rupture par clivage indépendante de la taille des grains. Les calculs dynamiques conduisent à une dépendance de la contrainte à la rupture σ_f à la taille des grains et des carbures : pour les gros carbures et les petits grains, la rupture est influencée par les carbures. En revanche, lorsque les carbures sont petits, l'effet de taille de grain devient important.

Martin-Meizoso et al. (1994) et Echeverria et Rodriguez-Ibabe (2003) font apparaître la notion de barrières énergétiques à la propagation de la fissure. Ils proposent que la première étape critique du clivage est la propagation de la microfissure germinée d'une particule dans la matrice. La propagation de cette microfissure crée à travers du barrière matrice/matrice peut être nécessaire pour déclencher le clivage. Les deux paramètres importants sont la taille de particule et la capacité de la matrice à se déformer plastiquement. Si l'étape critique est la propagation de la fissure dans la particule, la taille de fissure dans l'équation de Griffith est la taille de la particule a, avec l'énergie effective de surface γ_{pm}, et si la propagation critique est la propagation à travers la matrice, la taille critique de fissure est la taille de grain D, avec l'énergie effective de surface γ_{pm} (figure II-6). Ils proposent que, la taille des particules n'est pas le seul paramètre sur la rupture par clivage et on peut modifier la ténacité avec la taille des grains.

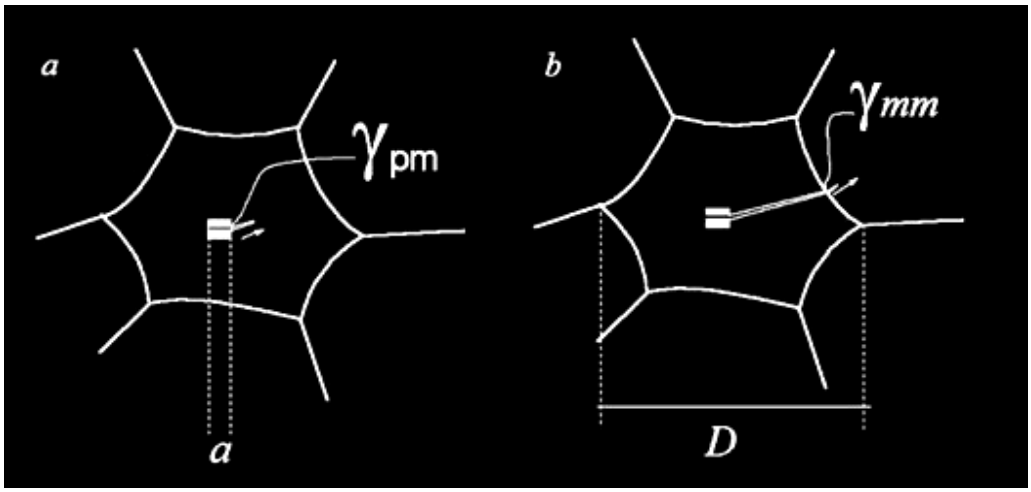


figure II-6 : Étapes de propagation de microfissure (a) propagation de microfissure dans la particule (b) à travers la matrice (Echeverria et Rodriguez-Ibabe, 2003)

Différents mécanismes de germination des microfissures de clivage sont rapportées. La rupture des carbures est fréquemment supposée être à l'origine de ces microfissures. Elle dépend du niveau de déformation macroscopique et de la direction de sollicitation. Par ailleurs, la taille des carbures et la taille des grains ont une influence sur la rupture par clivage. Ces deux grandeurs métallurgiques sont souvent liées. La barrière microstructurale qui contrôle la taille des microfissures peut être l'interface carbure-grain ou le joint de grain.

II.3 PREDICTION DE LA RUPTURE : APPROCHES LOCALES MACROSCOPIQUES

II.3.1 Modèle RKR

Ritchie, Knott et Rice (1973) se sont intéressés à la prédiction de la ténacité des aciers faiblement alliés dans la transition ductile-fragile. Ils basent leur modèle sur un critère en contrainte et donc en extension de microfissure : le clivage survient si la contrainte d'ouverture est supérieure à la contrainte critique σ_f, sur une distance critique δ_c ; ces 2 paramètres sont supposés indépendants de la température. La distance critique est introduite afin d'assurer un chargement suffisant pour que la microfissure amorcée dans un carbure, s'étende au grain voisin et provoque finalement la rupture de l'éprouvette.

Le champ HRR permet d'avoir la contrainte d'ouverture en avant de la fissure. En appliquant le critère de rupture à la distribution de contraintes définie par le champ HRR, la ténacité, K_{IC} s'écrit :

$$K_{Ic} = \sigma_y \sqrt{\delta_c \beta \left(\frac{\sigma_f}{\sigma_y} \right)^{n+1}} \qquad \text{(II.4)}$$

avec n le coefficient d'écrouissage dans la loi de Ramberg-Osgood, β un coefficient qui dépend de n, σ_y la limite d'élasticité, et σ_f la contrainte de rupture par clivage. Aux basses températures la limite d'élasticité σ_y est élevée et donc un chargement faible suffit pour atteindre la contrainte critique de clivage, ce qui conduit à une faible ténacité. Par contre, dans le cas des hautes températures, la limite d'élasticité est faible et une ouverture plus élevée accompagnée de l'augmentation de la zone plastique, est nécessaire pour déclencher le clivage, ce qui induit une ténacité plus élevée. Malgré l'introduction de l'influence de la température au travers de la limite d'élasticité, leur approche montre des difficultés à prédire l'augmentation brutale de la ténacité dans la transition ductile-fragile.

Curry et Knott (1976) utilisent le modèle RKR pour un acier ferritique comportant différentes tailles de grain. Ils concluent que la distance caractéristique doit être associée à la distribution de taille des carbures à l'origine de la rupture. La taille des grains et des carbures ne sont pas indépendantes et le clivage des acier sphéroïdisés peut être considéré comme la propagation d'une microfissure de type « penny shape », provenant d'un carbure. Curry et Knott (1979) présentent un modèle pseudo-statistique de rupture, basé sur la distribution de taille des carbures sur une distance caractéristique inférieure à la taille de la zone plastique.

Bowen et al. (1987) comparent les résultats du modèle RKR pour un acier A533B avec différentes microstructures issues de différents traitements thermiques. Pour le cas de la microstructure ferritique et des carbures sphéroïdaux, ils ont mesuré deux distances caractéristiques différentes aux températures de -196 et -140°C. En prenant celle obtenue à la température de -140°C, ils constatent que le modèle RKR sous-estime la ténacité dans le domaine de transition (figure II-7).

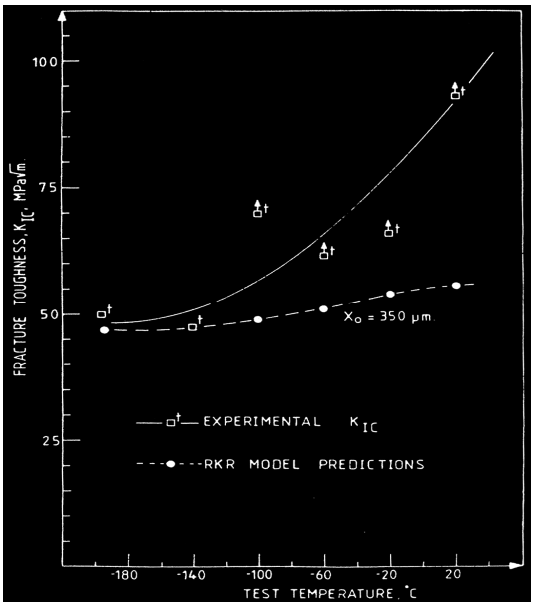


figure II-7. Comparaison entre le modèle RKR et les résultats expérimentaux pour un acier sphéroïdisé (Bowen et al., 1987)

Curry (1980) obtient le même type de résultat : le passage du palier bas de la ténacité à la transition ne peut pas être décrit avec des paramètres constants. Les explications proposées pour ce désaccord sont essentiellement de deux ordres :

- mécanique : dans la transition, la pré-fissure s'émousse et le champ HRR devient trop approximatif ; les effets contraires de l'échauffement adiabatique et la vitesse de déformation sont évoqués ;
- matériau : on peut remettre en cause l'hypothèse de mécanismes de clivage contrôlés par la contrainte principale et indépendants de la température.

II.3.2 Modèle de Weibull-Beremin

La rupture fragile par clivage est un phénomène statistique qui est contrôlé par la germination ou l'extension de microfissures de clivage qui sont des points faibles. La répartition spatiale de ces points est aléatoire : une variation des contraintes à la rupture par clivage est observée. La distribution de la résistance du matériau doit être prédite par une loi probabiliste. Un effet d'échelle est mis en évidence, c'est-à-dire une variation de la contrainte moyenne à la rupture avec le volume sollicité. Dans le cas de la rupture par clivage, la résistance moyenne diminue lorsque le volume sollicité augmente. La théorie du maillon le plus faible rend compte de cette évolution.

Avec la théorie du maillon le plus faible, le matériau est considéré comme une chaîne divisée en plusieurs maillons indépendants. La rupture a lieu dès que l'un de ces maillons rompt. La résistance du matériau (la chaîne) est donc égale à la résistance du maillon le plus faible. L'effet d'échelle s'explique par l'augmentation de la probabilité de trouver un point faible lorsque le volume augmente.

Weibull a proposé un modèle probabiliste de rupture basé sur l'hypothèse du maillon le plus faible. Beremin (1983) a proposé un modèle probabiliste également basé sur l'hypothèse du

maillon le plus faible pour l'appliquer à la rupture par clivage dans les aciers. Le modèle suppose que le critère de rupture est un critère en contrainte principale maximale. Les défauts sont des microfissures de clivage dont la densité de distribution de longueur a, suit la loi suivante : α/a^{β} . En intégrant sur toutes les tailles possibles (de 0 à l'infini, ce qui suppose qu'il n'y a pas de taille maximale de défaut et donc pas de seuil en contrainte pour le clivage), et en reliant la taille des défauts à la contrainte d'extension via le critère de Griffith, on retrouve un modèle de Weibull à 2 paramètres avec $m=2\beta-2$. En tenant compte de l'irréversibilité de la rupture, la probabilité de rupture au temps de chargement t, s'écrit :

$$P_r^t = 1 - \exp\left(-\left(\frac{\sigma_w^t}{\sigma_u} \right)^m \right) \qquad \text{(II.5)}$$

avec m le module de Weibull, σ_u la contrainte de normalisation et σ_w la contrainte de Weibull :

$$\sigma_w^t = \sqrt[m]{\int_{V_p^t} \left(\underset{0 \le \tau \le t}{\text{Max}}\, \sigma_1^{\tau} \right)^m \frac{dV}{V_0}} \qquad \text{(II.6)}$$

où τ est une variable de temps, V_p^t est le volume plastifié au temps t, σ_1^{τ} la contrainte principale maximale au temps τ, V_0 le volume élémentaire représentatif du mode de rupture par clivage. Compte-tenu des mécanismes de germination des microfissures de clivage liés au comportement basse température des C.C., ces défauts ne peuvent se trouver que dans un volume plastifié à basse température. Les paramètres du modèle de Weibull étant des paramètres du matériau, ils sont indépendants de la géométrie de l'essai et peuvent être utilisés pour prédire la rupture d'une éprouvette préfissurée ou non, si les mécanismes sont identiques. Les paramètres sont supposés être indépendants de la température et ne dépendent que du matériau. Cela revient à faire l'hypothèse implicite que la distribution de défauts est intrinsèque au matériau. Or, les défauts sont créés lors du chargement à partir de la déformation, et leur distribution dépend de la déformation. Nous reviendrons sur ce point dans la discussion sur les critères.

En introduisant le champ HRR, une relation entre la limite d'élasticité σ_0, la ténacité K_{Ic} et l'épaisseur de fissure B, peut être obtenue :

$$\sigma_0^{m-4} K_{Ic}^4 B = C \qquad \text{(II.7)}$$

où C et une constante. Donc la ténacité K_{Ic}, varie avec la température au travers de la dépendance en température de la limite d'élasticité σ_0, comme dans le critère RKR. Cependant cette variation reste insuffisante au regard des résultats expérimentaux dans le domaine de transition ductile-fragile.

Wallin et al. (1984) ont également développé un modèle probabiliste. Celui-ci relie la ténacité K_{IC} à la distribution des carbures. Il est basé sur la propagation des microfissures issues de carbures fissurés : le modèle WST. La démarche est sensiblement la même que celle suivie pour obtenir le modèle de Beremin et elle est appliquée pour prédire la ténacité. La rupture se produit quand la contrainte d'ouverture de la fissure $\sigma_{yy} = f(\sigma_y, X, K_I, n, E)$, (avec σ_y la limite d'élasticité, X la distance à la pointe de fissure, K_I le facteur d'intensité des contraintes et n l'exposant d'écrouissage) passe la valeur la contrainte de clivage σ_f (II.2).

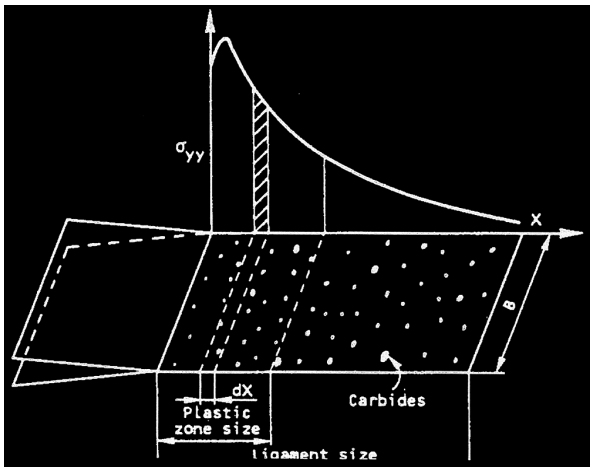


figure II-8 : Schématisation du modèle WST appliqué pour la prédiction de la ténacité (Wallin et al. 1984)

La contrainte de clivage est liée à la présence de microfissures dans les carbures. Un critère de type Griffith est utilisé (équation(II.2)) pour déterminer la taille des microfissures critiques. Cette taille critique r_0 varie avec la contrainte de traction σ_{yy} à la pointe de fissure :

$$r_0 = \frac{\pi E(\gamma_p + w_P)}{2(1-\nu^2)\sigma_{yy}{}^2} \qquad \text{(II.8)}$$

w_p est une fonction croissante de la température (équation(II.3)). Si le nombre des carbures par unité de surface N_a, et la distribution de taille des carbures sont connus, la probabilité de la rupture s'écrit :

$$P_F = 1 - \prod_{X=0}^{X_0} [1 - P(r \geq r_0)]^{N_a . B . dX . F} \qquad \text{(II.9)}$$

avec $P(r \geq r_0)$ la probabilité d'avoir un carbure avec un rayon supérieur à r_0, B l'épaisseur de l'éprouvette, F la fraction des carbures intervenant dans la rupture (constante avec la température), X_0 la taille de la zone plastique et dX la distance élémentaire en avant de la pointe de la fissure. Wallin et al. utilisent la distribution de Jayatilaka et al. (1977) pour définir la densité de distribution de taille de carbures :

$$p(r_0) = \frac{c^{a-1}}{(a-2)!}\left(\frac{r_0}{r}\right)^{-a} \exp[-c/(r_0/\overline{r})] \qquad \text{(II.10)}$$

avec c et a des constantes et $\overline{r}$ le rayon moyen des carbures. $P(r \geq r_0)$ est la fonction cumulée normalisée obtenue par l'équation (II.10).

On doit noter que si l'on ne conserve que la partie puissance de cette distribution (qui est en fait la partie active pour la rupture), on retrouve le modèle de Beremin, excepté que la contrainte critique dépend de la température au travers de w_p. Ils ont réussi à prédire la variation de la ténacité K_{IC} en fonction de la température, en faisant varier la valeur de w_p en température pour un acier ferritique et un acier bainitique.

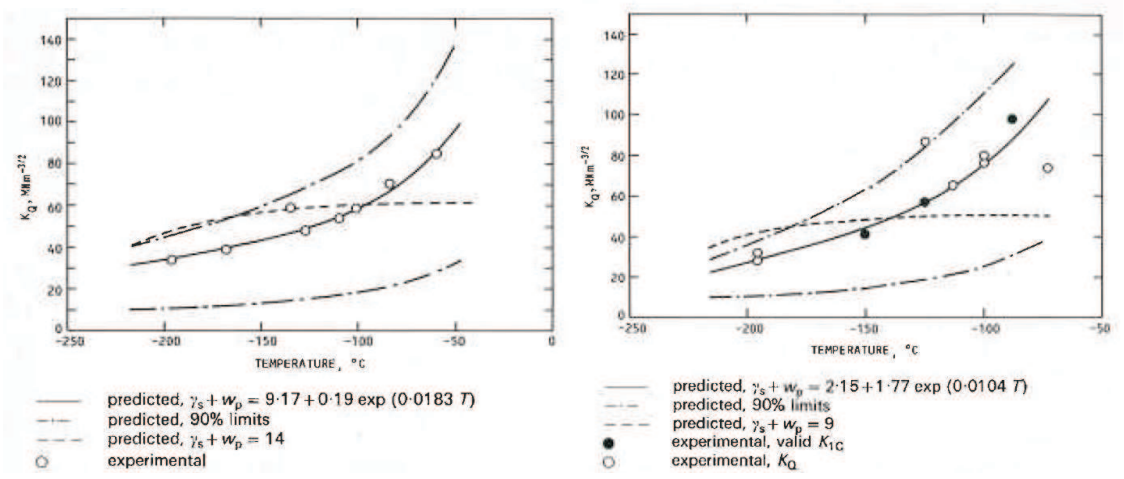


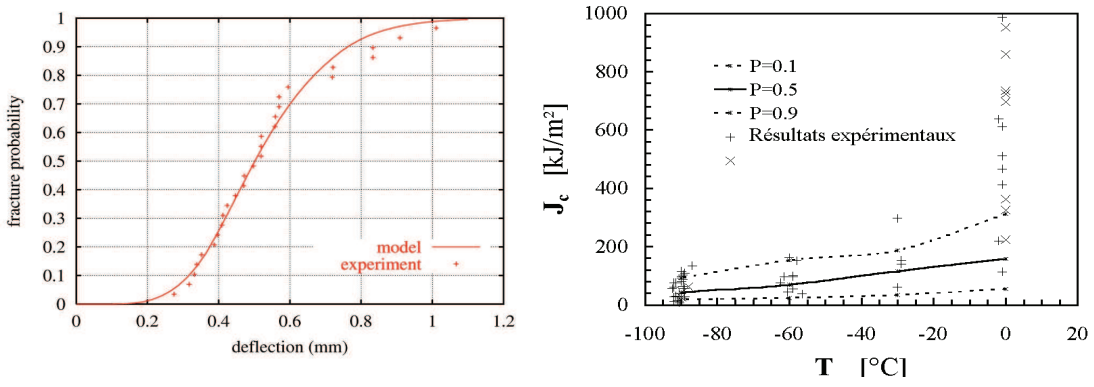
figure II-9 : Comparaison des valeurs prédites de la ténacité KIC avec l'expérience pour un acier ferritique (a) et un acier bainitique (b)

II.3.3 Application de l'approche probabiliste à la transition ductile-fragile

Rossoll (1998), Bernauer et al. (1999), Tanguy (2001) et Haušild et al. (2005) ont effectué des études afin de décrire la rupture des aciers bainitiques dans la transition ductile-fragile. Ils ont utilisé le modèle de Beremin. Dans ces travaux, la déchirure ductile qui précède la rupture fragile a été prise en compte par des modèles d'approches locales adaptées à l'endommagement ductile : le modèle GTN (modèle de Gurson modifié par Tvergaard et Needleman) ou le modèle de Rousselier.

La prédiction de la rupture par clivage sur le palier bas de la transition est satisfaisante. On peut déterminer les paramètres du modèle de Beremin à partir d'essais de résilience et les appliquer à la prédiction de la ténacité (Rossoll, 1998, Tanguy et al. 2005 b) en prenant en compte le comportement viscoplastique du matériau. Les paramètres trouvés sont sensiblement les mêmes pour des aciers bainitiques de composition légèrement différentes. Ces paramètres sont par ailleurs très proches de ceux trouvés par Beremin en 1983 sur un acier du même type. Il est intéressant de noter que la simulation des essais de rupture en flexion sur des barreaux entaillés statiques ou dynamiques (essai Charpy) est réalisée de façon satisfaisante avec les mêmes paramètres du modèle de Weibull (Haušild, 2002, Tanguy et al., 2005 b) alors que les vitesses de déformation peuvent atteindre 10^3 s^{-1} au bord de l'entaille dans les essais dynamiques.

La prise en compte de la déchirure ductile permet d'augmenter la valeur de la résilience ou de la ténacité à la rupture. En effet, on montre que dans la transition, la résilience est due à la déformation plastique volumique qui accompagne la déchirure (Haušild et al., 2002). Cependant, ces travaux montrent que la prédiction du clivage dans la transition à partir des paramètres du modèle de Beremin identifiés à basse température, sous-estime la ténacité (figure II-10). On retrouve les difficultés rencontrées par Ritchie et al. (1973), Curry (1980), Bowen et al. (1987) lors de l'application du modèle RKR, bien que dans les travaux plus récents, la déchirure ductile ait été prise en compte.



(a) (b)

figure II-10. Identification des paramètres de Beremin sur les essais de résilience à -90°C (a). Prédiction de la ténacité en fonction de la température (b) (Haušild, 2002).

Haušild et al. (2005) et Tanguy et al. (2005 b) trouvent des paramètres de Weibull qui varient avec la température dans le domaine de la transition ductile-fragile. Haušild (2002) étudie la dépendance en température des 2 paramètres m et σ_u ou d'un seul. Dans le cas où seul σ_u varie, il propose :

$$\sigma_u(T) = A\exp(B/T) \qquad \text{(II.11)}$$

avec T en K, m=18 V_0=0.001mm^3, A=4700 MPa, B= -103,3 K (ce qui correspond aux valeurs de σ_u=2675 MPa à -90 °C, σ_u=2895 MPa à -60 °C, σ_u=3075 MPa à -30 °C, σ_u=3220 MPa à 0 °C). Tanguy aboutit à des valeurs un peu plus élevées (figure II-11) pour un même module de Weibull, mais pour un matériau qui a une température de transition plus basse que celui de Haušild.

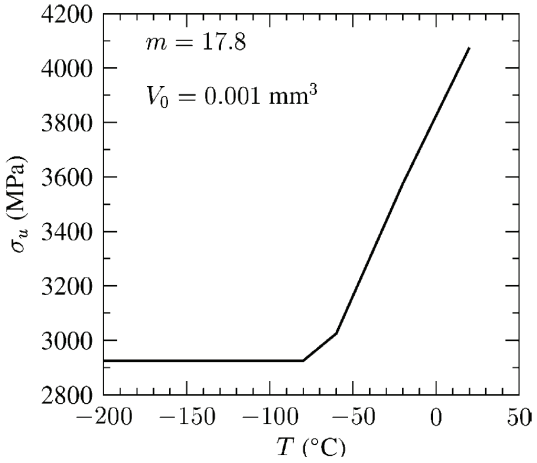


figure II-11. Identification de σ_u en fonction de la température par Tanguy et al. (2005)

Par ailleurs, Haušild et al. (2005) proposent d'introduire une contrainte seuil (modèle de Weibull à trois paramètres) afin de rendre compte de l'asymétrie de la distribution de rupture expérimentale. La contrainte seuil est estimée à 1400 MPa qui est la valeur minimale de la contrainte de clivage déterminée à partir des sites d'amorçage et des calculs par éléments finis. Ils ont ainsi amélioré la prévision de la ténacité à partir de la résilience (figure II-12) en

particulier pour les faibles valeurs de probabilité, ce qui assure une prédiction raisonnablement conservative.

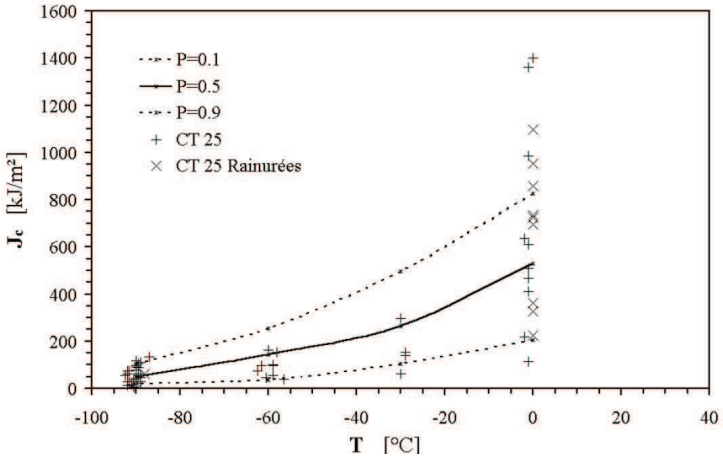


figure II-12. Prévision de la ténacité avec une contrainte seuil, σ_0= 1400 MPa, m = 2 $\sigma_u(T) = 650\,000 \exp\left(\frac{-665}{T+273.13}\right)$ identifiés sur les essais Charpy (Haušild, 2002)

L'identification de la dépendance en température des paramètres de Weibull est phénoménologique. Les changements dans les mécanismes contrôlant le clivage ou dans la population des défauts sont susceptibles d'expliquer cette évolution des paramètres avec la température. Le modèle de Beremin basé sur la seule contrainte principale maximale est également remis en cause.

II.4 DISCUSSION SUR LES APPROCHES LOCALES MACROSCOPIQUES

II.4.1 Relation microstructure-rupture

Dans les aciers ferritiques à film de cémentite ou à carbures sphéroïdisés, les germes de clivage sont issus de la rupture des carbures. L'entité microstructurale critique est alors le carbure ou le grain ferritique si les joints de grains sont des barrières à la propagation du clivage. Elle est plus complexe à déterminer dans les aciers bainitiques. Brozzo et al. (1978) proposent le paquet de lattes de bainite comme entité contrôlant la contrainte de clivage. Pour Zhang et Knott (1999) ce sont les colonies de carbures qui sont critiques. Cependant, les observations montrent qu'ils peuvent être aussi des obstacles à la fissuration, car on les retrouve dans les marches de cisaillement entre les facettes de clivage (Haušild, 2002). Des études fractographiques ont montré la présence des inclusions de sulfure de manganèse sur les faciès de rupture (Bowen, 1987 et Curry et Knott,1984, Renevey, 1997, Mäntylä et al., 1999). Ainsi, les sulfures de manganèse sont évoqués comme concentrateurs de contraintes. Mais ils sont moins présents dans d'autres aciers (comme celui de Tanguy et al., 2005) et les conclusions sur les paramètres de Beremin sont les mêmes. Ainsi, l'idée d'un effet majeur des amas de sulfure de manganèse dans la transition ductile-fragile des aciers bainitiques a finalement été écartée (Haušild, 2002).

Mäntyla et al. (1999) ont observé les sites d'amorçage du clivage d'un acier bainitique et ils ont trouvé des natures de site d'amorçage variées. Ils ont constaté trois types de site d'amorçage du

clivage dans une gamme de température entre -90 et -30°C pour les éprouvette de type CT et Charpy : les inclusions sphériques de sulfure manganèse ou oxyde de diamètre de 2-3µm. Les grandes inclusions allongées de sulfure manganèse de diamètre supérieure de 100µm. D'autres caractéristiques particulières ont été rencontrées dans la zone d'amorçage du clivage : joints de grains, grandes facettes du clivage (indiquant des gros grains), interface ductile/fragile (seulement dans les essais Charpy), carbure dans un grain (seulement dans les éprouvettes CT). Les sites suivants ont été observés par Tanguy et al. (2005) : grande facette de clivage, cémentite, carbure de titane, inclusions de sulfure manganèse (MnS) (figure II-13).

Aucune variation dans la nature de site d'amorçage de clivage avec la température n'a été mise en évidence par Tanguy et al. (2005). En revanche Haušild et al.(2005), suite à des observations fractographiques, montrent différents mécanismes de rupture aux sites d'amorçage : la rupture due à des particules de MnS ou de seconde phase aux basses températures et des mécanismes de type Cottrell aux plus hautes températures (figure II-14). Dans ces deux travaux (Tanguy et al., 2005 et Haušild et al., 2005), les auteurs évoquent l'influence possible de l'irrégularité du front de déchirure ductile sur le déclenchement du clivage.

En conclusion, l'identification de la microstructure critique dans les aciers bainitiques reste difficile.

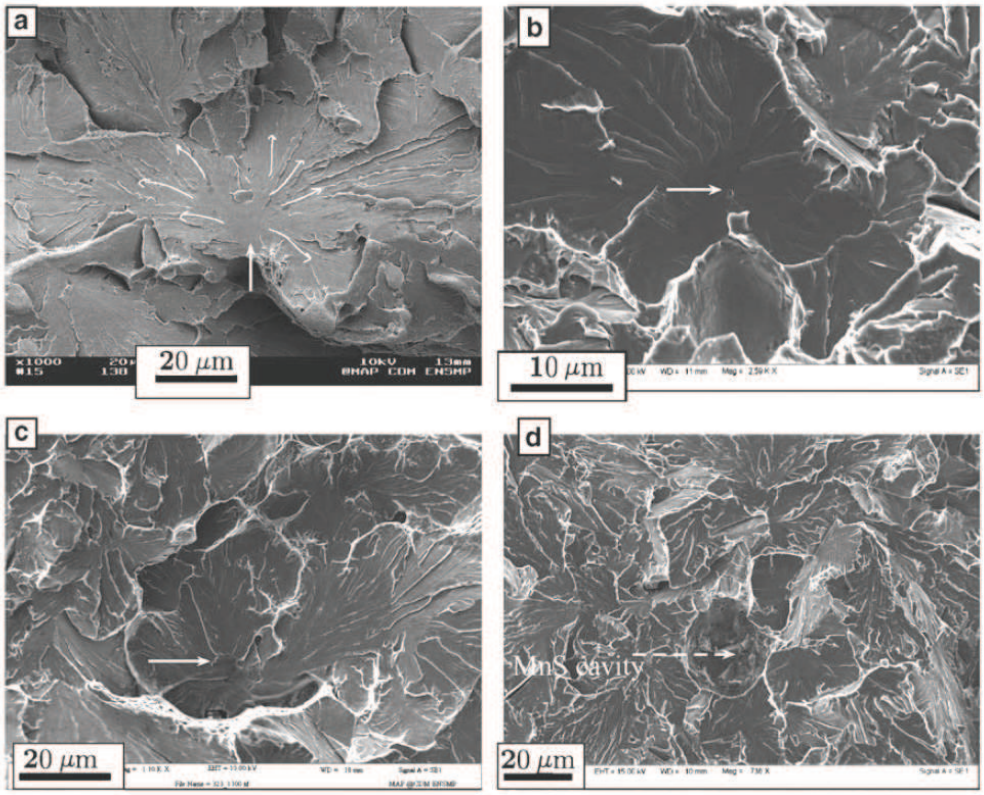


figure II-13. Différents types de sites d'amorçage du clivage, (a) facette avec faible désorientation, (b) cémentite associée à une cavité ductile, (c) particule de seconde phase (TiC), (d) cavité issue d'une inclusion de sulfure manganèse (Tanguy et al., 2005)

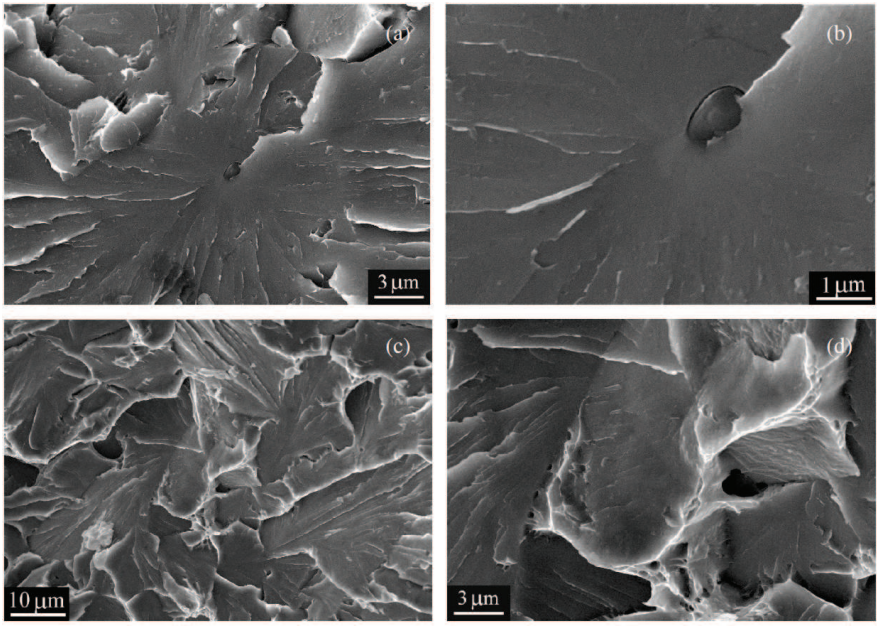


figure II-14 : (a,b) Amorçage du clivage sur une particule de MnS dans une éprouvette CT 25 rompue à -90 °C ; (c,d) Amorçage du clivage par un mécanisme induit par la déformation plastique dans une éprouvette CT rompue à 0 °C (Haušild et al.,2005)

II.4.2 Etats mécaniques et site de rupture

De nombreux modèles de clivage sont basés sur la théorie du maillon le plus faible avec un critère en contrainte principale maximale : la rupture finale de l'éprouvette a lieu lorsque la contrainte principale maximale dépasse une contrainte critique, la contrainte de clivage. La dépendance en température de cette contrainte de clivage est discutée, ainsi que l'influence de la déformation et du taux de triaxialité des contraintes.

La contrainte critique de clivage peut être déterminée à l'aide des observations fractographiques et des calculs par éléments finis : le site de rupture est localisé sur la surface de rupture puis dans le calcul par éléments finis ; on peut donc obtenir les valeurs de toutes les variables mécaniques sur le site du clivage à l'instant de la rupture, en particulier la contrainte de clivage qui est la contrainte principale maximale sur le site de rupture à l'instant de rupture (figure II-15).

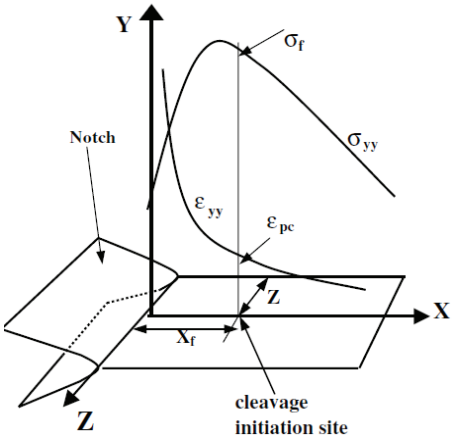


figure II-15. Schéma de mesure de la contrainte critique du clivage (Wang et al., 2004)

Bowen et al. (1987) ont étudié les sites d'amorçage pour un acier A533B ayant subi différents triatements thermiques et présentant donc différentes microstructures (Martensitique, bainitique, ferritique). En utilisant les calculs numériques, ils ont montré que la contrainte de clivage est indépendante de la température quelle que soit la microstructure (figure II-16). Différents auteurs aboutissent à la même conclusion. Parmi eux, Yang et al. (2004) qui ont étudié un acier bainitique testé par des essais Charpy, ainsi que Wang et al. (2003) qui ont réalisé des essais de flexion 4 points sur des aciers au carbone-manganèse.

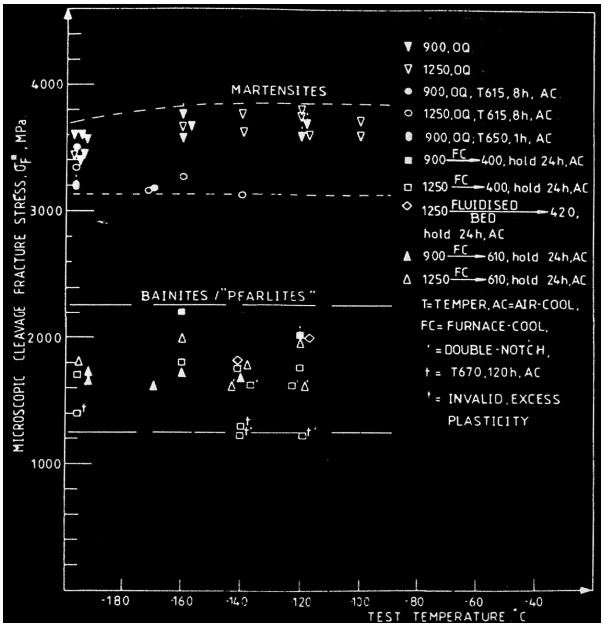
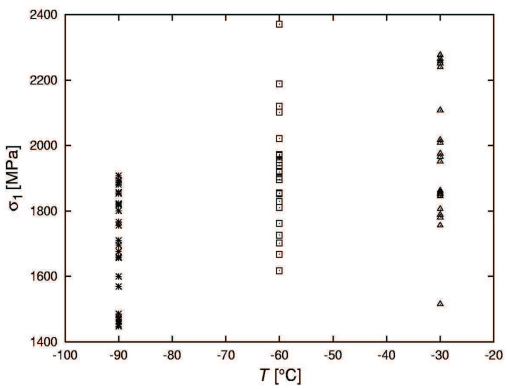
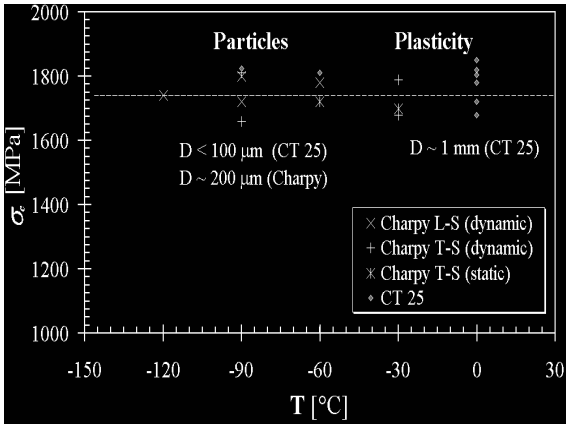


figure II-16. Contrainte de clivage en fonction de la température pour différentes types de microstructure d'un acier A533B (Bowen et al., 1987)

Rossoll (1998) a trouvé une dépendance en température de la contrainte critique de clivage pour un acier 16MND5 (type A508) testé par des essais Charpy entre -90 et -30°C. Haušild (2002) qui a étudié le même acier rompu selon différents types d'essais, ne confirme pas ce résultat, mais le nombre de valeurs est réduit (figure II-17).



(a)



(b)

figure II-17. Evolution de la contrainte de clivage en fonction de la température pour un acier 16MND5 (a) (Rossoll, 1998) (b) (Haušild, 2002)

Mäntylä et al. (1999) déterminent la rupture par les coordonnées des sites d'initiation de clivage dans les essais de résilience et de ténacité. Les coordonnées des sites de clivage sont mesurées suivant le schéma présenté sur la figure II-18(a). La distance mesurée entre le site d'amorçage et le bord d'éprouvette (x) montre que les sites d'amorçage se localisent davantage vers le centre des éprouvettes lorsque la température augmente (figure II-18(b)) ; cela peut s'expliquer par le niveau de contrainte d'ouverture qui varie dans l'épaisseur de l'éprouvette et qui est moins élevé lorsque l'on s'approche des surfaces libres. A basse température, le niveau de contrainte est élevé car la limite d'écoulement l'est également : il peut être suffisant pour un déclenchement du clivage tout le long du front de fissure. Lorsque la température augmente, le déclenchement du clivage nécessite un niveau de contrainte que l'on ne trouve qu'au centre de l'éprouvette. Ces résultats sont en accord avec un critère en contrainte principale maximale.

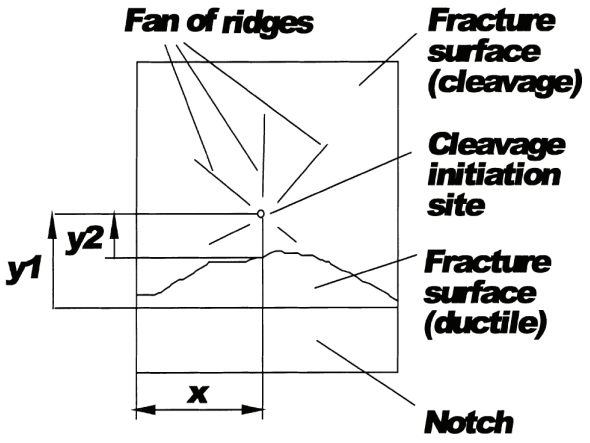
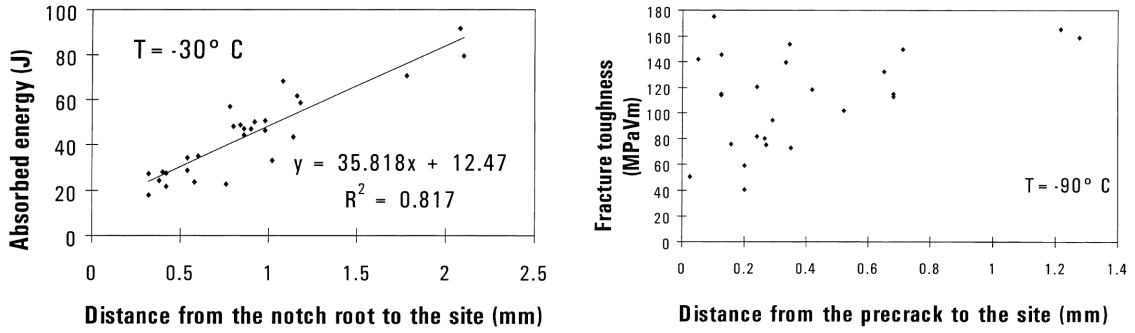


figure II-18. Présentation des coordonnées de site du clivage dans un essai Charpy (Mäntylä et al. (1999))

Aucune relation n'est trouvée entre l'énergie absorbée par l'éprouvette et la distance entre le site d'amorçage et l'entaille (y_1) à -90 et -60°C, températures auxquelles il n'y a pas de déchirure ductile. En revanche à -30°C une corrélation linéaire peut être trouvée entre l'énergie absorbée par l'éprouvette et la distance du site d'amorçage à la pointe de l'entaille (figure II-19(a)). Ceci est simplement lié à la déchirure ductile qui est comptée dans cette distance et dont dépend l'énergie absorbée par l'éprouvette. La ténacité mesurée par les essais CT (compact tension) augmente lorsque la distance entre le site de l'amorçage du clivage et la pointe de préfissure (y_1) augmente (figure II-19(b)) en l'absence de déchirure. Cela peut également s'expliquer par l'évolution de la contrainte d'ouverture avec le chargement (voir par exemple la figure II-21) : plus le chargement augmente, c'est-à-dire plus la ténacité augmente, plus le pic de contraintes d'ouverture s'éloigne de la pré-fissure. Par contre, on note que l'on peut trouver des sites d'amorçage très proches de la pointe de fissure, même pour des ténacités élevées : ces sites correspondent à des forts niveaux de déformation, mais pas aux plus forts niveaux de contraintes.



(a) (b)

figure II-19. (a) Evolution de l'énergie absorbée à la rupture en fonction de la distance du site du clivage à la pointe de l'entaille d'une éprouvette Charpy à -30°C (b) Evolution de la ténacité en fonction de la distance du site du clivage à la pointe de la fissure d'une éprouvette CT à -90°C (Mäntylä et al. (1999))

Tanguy et al. (2005) ont identifié les sites d'amorçage du clivage sur les faciès de rupture des essais Charpy. Ils ont montré que, quelle que soit la nature des sites d'amorçage, la distance moyenne entre l'entaille et ces sites (y_1) augmente avec la température, ainsi que la dispersion (figure II-20). La corrélation entre la distance moyenne et l'énergie provient en fait de l'avancée de déchirure ductile : celle-ci est accompagnée par de l'énergie dissipée plastiquement qui représente la majeure partie de la résilience. On retrouve les résultats de la figure II-19.

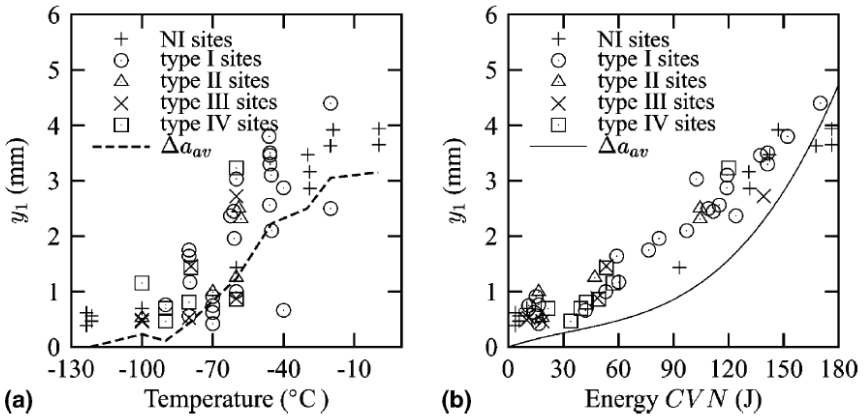


figure II-20. Distance entre la pointe de l'entaille et le site d'amorçage pour différentes natures des sites en fonction de (a) la température, (b) l'énergie à la rupture (Tanguy et al., 2005)

Dans le modèle de Beremin, le critère en contrainte principale maximale est le critère de rupture et ce critère ne s'exprime que dans le volume plastifié. Dans ce cas, les sites d'amorçage du clivage ne devraient pas se trouver entre la pointe de fissure et le pic de contrainte d'ouverture mais plutôt avant ou sur le pic de contrainte d'ouverture (si l'on suppose que le site est dans le plan de symétrie de l'éprouvette. En effet, les points situés entre la pointe de fissure ou de l'entaille et le pic de contrainte ont subi des niveaux de contraintes supérieurs aux instants précédents (figure II-21). Wang et al. (2004) ont réalisé des essais de rupture sur des éprouvettes de flexion 4 points entaillées, en acier faiblement allié. Ils ont identifié les sites d'amorçage du clivage. La figure II-22 montre la localisation de ces sites (X_f) par rapport à la distance entre l'entaille et le pic de contrainte d'ouverture (DMS) aux températures -130°C et -196°C. Le

travail a été réalisé pour deux types d'aciers au carbone manganèse avec deux tailles de carbures (FC : petit carbure, CC : gros carbure). Quelle que soit la température, les auteurs trouvent des sites de part et d'autre du pic de contrainte d'ouverture. A la température de -196°C, les sites d'amorçage sont proches du pic de contrainte d'ouverture.

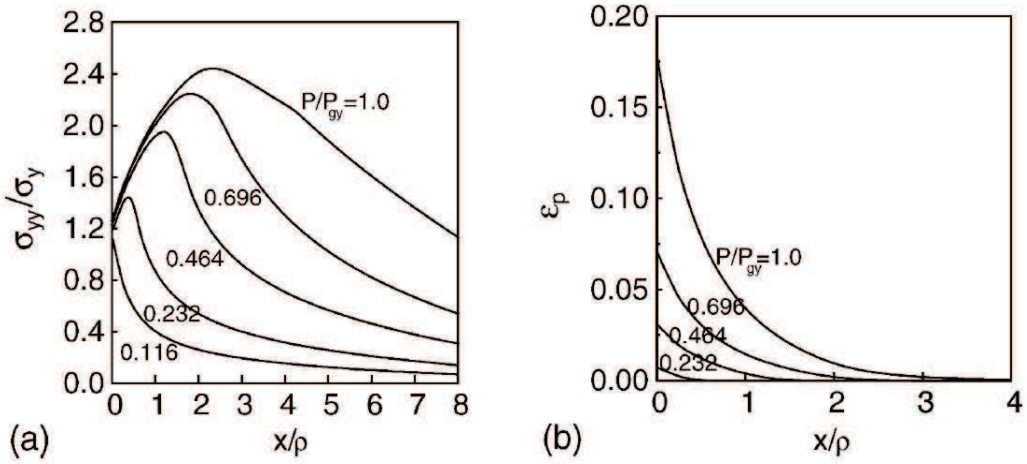


figure II-21 : Evolution de la contrainte d'ouverture pour différents niveaux de P/P_{gy} où P est le chargement appliqué et P_{gy} est le chargement limite (a) et de la déformation plastique équivalente cumulée (b) le long du ligament d'une éprouvette de flexion entaillée où X est la distance de l'entaille et ρ et le rayon d'entaille (Wang et al. 2004)

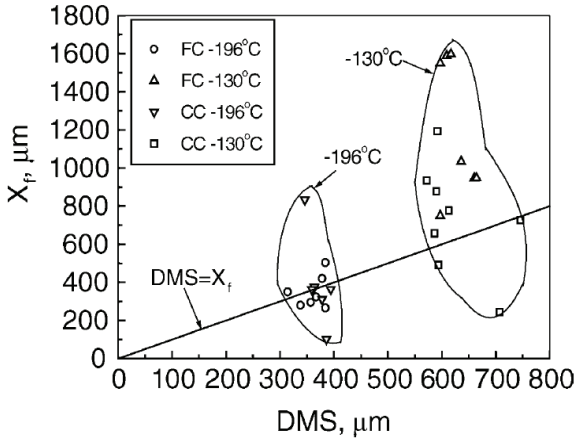


figure II-22. Sites d'amorçage de rupture pour les essais de flexion 4 points aux températures -196 et -130°C (Wang et al., 2004)

Bordet et al. (2005) ont identifié les sites d'amorçage du clivage sur des éprouvettes SENB (Single Edge Notched Bend specimen) en acier 450EMZ (0.1% carbone) à -130°C. En comparant la distance de ces sites à la pointe de l'entaille, avec les résultats de calcul par éléments finis, ils ont trouvé tous les sites d'amorçage entre le maximum de contrainte d'ouverture et l'entaille (figure II-23).

Ces résultats amènent à discuter le critère de rupture.

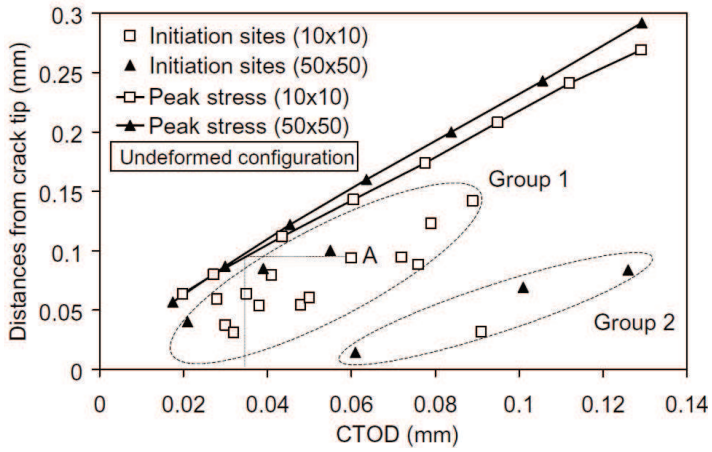


figure II-23. Sites d'amorçage de rupture pour les essais SENB à -130°C en fonction de l'ouverture de la fissure (Bordet et al., 2005)

II.4.3 Critères locaux macroscopiques

Les résultats précédents peuvent indiquer que la déformation plastique joue un rôle important dans le déclenchement de la rupture par clivage. La germination des microfissures de clivage nécessite effectivement de la déformation plastique (voir paragraphe II.2). Ainsi, de nombreux auteurs ont proposé des modèles intégrant l'effet de la déformation plastique ou des critères de germination.

Beremin (1983) a pris en compte l'effet de la déformation plastique dans son modèle :

$$\sigma_w = \sqrt[m]{\int_{V_p} \sigma_1^m \frac{dV}{V_0} \exp\left(-\frac{m\varepsilon_1}{2}\right)} \qquad \text{(II.12)}$$

Avec ε_1 la déformation principale maximale. Plus la déformation est élevée, plus la contrainte de Weibull est faible. Lors de l'application d'une pré-déformation de traction à température ambiante, Beremin a constaté que la contrainte de clivage augmentait avec la déformation cumulée à la rupture. L'une de ses explications est la réduction de la taille de grain dans la direction perpendiculaire à la direction principale maximale relative à la déformation. Ceci limite la taille des microfissures. Dans cette proposition la déformation n'est pas la variable qui pilote la germination des microfissures, mais elle pilote leur taille.

Margolin et al. (1998) ont modifié le critère local de rupture par clivage de Beremin en ajoutant un critère de germination. Le critère de germination est basé sur le calcul de la concentration de contrainte créée par un empilement de dislocations sur une particule. Ainsi, la rupture nécessite deux critères, l'un de germination et l'autre de propagation :

$$\sigma_1 + m_{T\varepsilon}(\sigma_{eq} - \sigma_Y) \geq \sigma_d \qquad \text{(II.13)}$$

$$\sigma_1 \geq S_c(\varepsilon^p) \qquad \text{(II.14)}$$

où σ_1 est la contrainte principale maximale, $m_{T\varepsilon}$ un paramètre dépendant de la température et de la déformation plastique, σ_{eq} la contrainte équivalente de von Mises, σ_Y la limite d'élasticité, σ_d la résistance des particules, $S_c(\varepsilon^p)$ la contrainte critique de clivage qui est une fonction de la

déformation plastique et tient compte des différentes barrières que doit franchir la microfissure lors de son extension. La probabilité de trouver une particule de résistance inférieure ou égale à σ_d dans le volume élémentaire, suit une distribution de Weibull. La probabilité de rupture s'écrit comme un modèle de Weibull, avec une variable aléatoire qui est la contrainte d'extension ou la contrainte de germination si le critère d'extension est satisfait. Ils ont montré que leur modèle permet de prédire la ténacité à partir des résultats sur les éprouvettes entaillées axisymétriques pour le bas de la transition. On doit noter qu'il existe un nombre important de paramètres à identifier dans ce modèle.

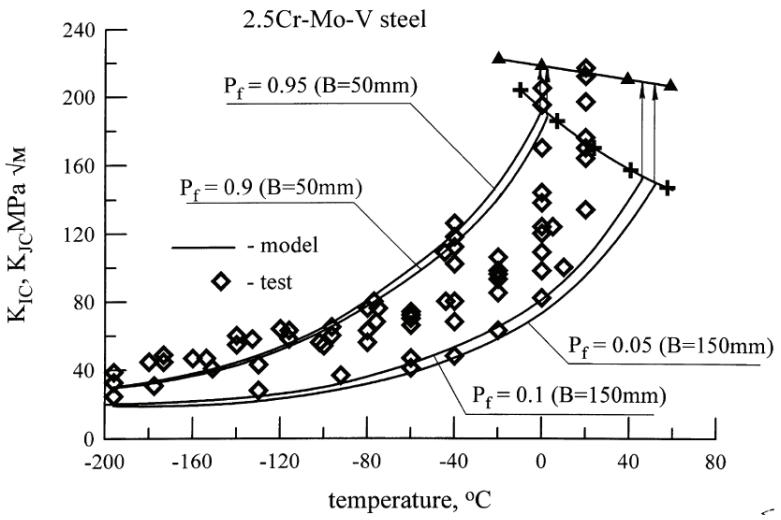


figure II-24. Comparaison entre les valeurs de la ténacité calculée par le modèle de Margolin et celles obtenues par l'expérience (Margolin et al., 1998)

Faleskog et al. (2004) ont développé un modèle basé sur la théorie du maillon le plus faible, en considérant deux probabilités élémentaires : une probabilité associée à la germination en fonction de la déformation plastique et une probabilité pour la propagation instable d'une microfissure sous l'effet de la contrainte principale maximale. La probabilité de rupture d'un volume élémentaire est donnée par :

$$dP_R = h_1(\varepsilon_{eq}^p) \times h_2(\bar{\sigma}_1)\frac{dV}{V_0} = h(\varepsilon_{eq}^p, \bar{\sigma}_1)\frac{dV}{V_0} \qquad \text{(II.15)}$$

$$h(\varepsilon_{eq}^p, \bar{\sigma}_1) = c\varepsilon_{eq}^p.\left\{\exp\left(-\left(\frac{\eta\sigma_{th}}{\bar{\sigma}_1}\right)^2\right) - \exp(-\eta^2)\right\} \qquad \text{(II.16)}$$

où ε_{eq}^p est la déformation plastique équivalente, $\bar{\sigma}_1$ une grandeur non-locale de la contrainte principale maximale, c, σ_{th} et η sont les paramètres du matériau qui dépendent de la température. La grandeur non locale est une moyenne de la contrainte principale maximale sur un volume de taille fixée. Cette moyenne permet de s'assurer que le critère sera satisfait sur un volume nécessaire à l'extension de la microfissure. La probabilité cumulée de rupture à un instant précis peut être écrite en prenant en compte l'histoire du chargement, comme :

$$P_f = 1 - \exp\left(-h_{max}\frac{dV}{V_0}\right) \tag{II.17}$$

où h_{max} est le maximum de $(h(\varepsilon_e^p(X), \overline{\sigma}_1(X))$ pendant le chargement et V_0 est un volume élémentaire. Ils ont trouvé un bon accord avec les résultats des essais Charpy sur un acier bainitique avec une identification phénoménologique des paramètres.

Bordet et al. (2005) introduisent également une probabilité de germination des microfissures, et la probabilité de clivage est également le produit de la probabilité de germination et de la probabilité d'extension d'une microfissure :

$$P_{cleav}\left(\sigma_1, d\varepsilon_p\right) = P_{nucl}\left(d\varepsilon_p\right) \times P_{propag}\left(\sigma_1\right) \tag{II.18}$$

La probabilité de germination est fonction de l'incrément de déformation plastique. Elle suit l'équation suivante :

$$P_{nucl}(d\varepsilon_p) \propto \frac{\sigma_{ys}(T,\dot{\varepsilon}_p)}{\sigma_{ys,0}} \exp\left[-\frac{\sigma_{ys}(T,\dot{\varepsilon}_p)}{\sigma_{ys,0}}\frac{\varepsilon_p}{\varepsilon_{p,0}}\right] d\varepsilon_p \tag{II.19}$$

où σ_{ys} est la limite d'élasticité, $\sigma_{ys,0}$ et $\varepsilon_{p,0}$ est la limite d'élasticité et la déformation plastique à une température de référence T_0.

La probabilité de propagation est basée sur la population de carbures ($f(r)$) et elle est nulle avant d'atteindre une contrainte seuil σ_{th}, qui correspond à la taille maximale des carbures et donc des micro-fissures :

$$P_{propag}(\sigma_1) = \int_{r_c(\sigma_1)}^{r_c(\sigma_{th})} f(r)dr \quad \text{avec} \quad f(r) = \alpha / r^{\beta} \tag{II.20}$$

où σ_1 est la contrainte principale maximale et r_c est la taille critique de microfissure obtenue par l'expression de Griffith pour une microfissure de type « penny shape » . Ils ont écrit l'équation (II.20) comme :

$$\begin{cases} P_{propag}(\sigma_1) = 0 & \sigma < \sigma_{th} \\ P_{propag}(\sigma_1) = \left(\left(\frac{\sigma_1}{\sigma_u}\right)^m - \left(\frac{\sigma_{th}}{\sigma_u}\right)^m\right) & \sigma \geq \sigma_{th} \end{cases} \tag{II.21}$$

Enfin, ils expriment une probabilité de rupture avec une fonction de type Weibull en introduisant une contrainte de Weibull σ^*_w. Cette contrainte est une fonction de la déformation plastique et de la contrainte principale maximale. Elle dépend de la limite d'élasticité du matériau aux différentes températures.

$$P_R = 1 - exp\left[-\int_{V_p}\int_0^{\varepsilon_{p,u}} P_{cleav} d\varepsilon_p \frac{dV}{V_0}\right] \tag{II.22}$$

où $\varepsilon_{p,u}$ est la déformation plastique équivalente, V_p est le volume plastifié et V_0 et σ^*_u sont des paramètres d'échelle.

Ils supposent que les paramètres sont indépendants de la vitesse de sollicitation ou de la température. Leur modèle est validé dans une gamme de température de -196 à -120°C (palier bas de la courbe de transition ductile-fragile) (figure II-25). On note néanmoins que la courbe d'iso-probabilité de rupture augmente peu avec la température ; on peut penser que la prédiction de la rupture dans le domaine de la transition ductile-fragile sera trop pessimiste. Les paramètres sont constants avec la température ; or, la germination des microfissures dépend de la déformation plastique mais aussi du niveau de contraintes, donc elle dépend probablement de la température par le biais de la loi d'écrouissage.

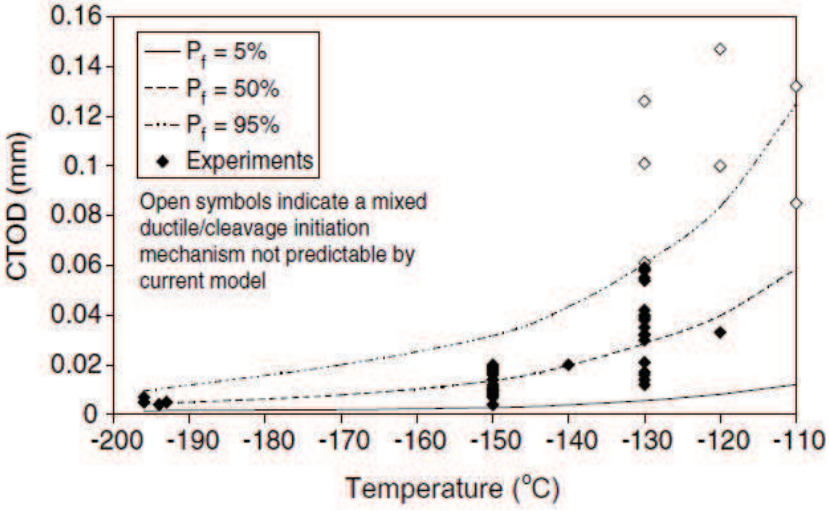


figure II-25. Prédiction de la ténacité dans le palier bas du domaine transition ductile-fragile (Bordet et al., 2005)

Wallin et Laukkanen (2008) ont eux aussi introduit l'effet de la déformation en développant une nouvelle version du modèle WST. Ils estiment qu'en l'absence d'une variable de déformation, l'effet de la température sur l'augmentation de la ténacité ne pourra être correctement pris en compte.

Chen et al. (2002) prennent en compte trois critères locaux de rupture : il faut dépasser 1) une déformation critique pour la germination de la microfissure, 2) un niveau de triaxialité de contrainte pour éviter l'émoussement de la microfissure nouvellement créée et 3) une contrainte principale maximale critique pour l'extension de la microfissure. Ainsi, ils ajoutent le taux de triaxialité des contraintes comme variable critique pour le clivage. Ils considèrent que la contrainte à la rupture est constante. En calculant précisément les états mécaniques en avant d'une entaille, et en tenant compte de l'amorçage d'une déchirure ductile, ils trouvent une distance minimale de la pointe de fissure pour satisfaire ces trois critères. Cette distance minimale est inférieure à la distance entre la pointe de fissure et le pic de contrainte d'ouverture. Les résultats expérimentaux montrent que des sites de clivage dans cette zone peuvent être expliqués ainsi. L'aspect probabiliste n'est pas pris en compte.

Gao et al. (2006) proposent un modèle probabiliste tenant compte de la germination par déformation plastique, de l'émoussement avec le taux des triaxialité des contraintes et de l'extension de microfissure. Ils reprennent l'idée de Lindley et al. (1970) et Gurland (1972)

concernant l'augmentation du nombre des carbures fissurés avec la déformation plastique. Ils proposent de modifier la densité de probabilité de taille des microfissures *a* utilisée par Beremin et introduisent ainsi l'effet de la déformation plastique :

$$f(a) = g(\varepsilon_p)a^{-\gamma} \quad \text{et} \quad g(\varepsilon_p) = k\varepsilon_p \tag{II.23}$$

où ε_p est la déformation plastique et $g(\varepsilon_p)$ est une fonction linéaire de la déformation plastique comme dans le modèle de Faleskog et al. (2004) présenté ci-dessus. Il faut rappeler que le taux de triaxialité des contraintes intervient dans le calcul du volume critique : ils considèrent seulement le volume plastique dans lequel le taux de triaxialité des contraintes est supérieur à 1.5. Une fonction de type Weibull à trois paramètres est utilisée pour la probabilité de rupture :

$$P_f(\sigma_w) = 1 - \exp\left[-\left(\frac{\sigma_w^{m/4} - \sigma_{w-\min}^{m/4}}{\sigma_u^{m/4} - \sigma_{w-\min}^{m/4}}\right)^4\right] \tag{II.24}$$

Les paramètres σ_u et $\sigma_{w\text{-}min}$ varient avec la température, tandis que le paramètre *m* est constant. La contrainte de Weibull σ_w est définie comme :

$$\sigma_w = \left[\frac{1}{V_0}\int_{V_p} \varepsilon_p \sigma_1^m\right]^{1/m} \tag{II.25}$$

où σ_1 est la contrainte principale maximale. La figure II-26 montre un exemple de comparaison entre l'expérience et leur modèle à -30°C pour différentes profondeurs de fissure.

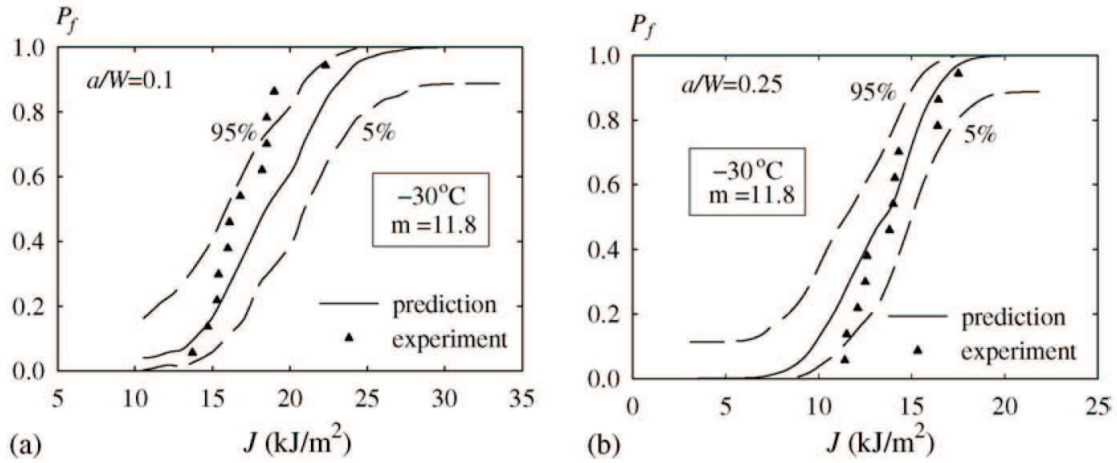


figure II-26. Comparaison entre les probabilités de rupture calculées et celles obtenues par l'expérience pour différentes profondeurs de fissure (a) *a/W*=0.1 (b) *a/W*=0.5 (Gao et al., 2006)

Höhe et al. (2009) utilisent également ces trois critères dans un modèle de rupture par clivage pour les aciers ferritiques. La probabilité de propagation est obtenue par la même démarche que Beremin, basée sur la distribution des tailles des défauts. La probabilité de germination est une fonction linéaire de la déformation plastique (ε_p) mais également une fonction exponentielle du taux de triaxialité des contraintes *h* :

$$P_{nucl} = C_2 e^{-C_1 h}\varepsilon_p \tag{II.26}$$

où C_1 et C_2 sont les paramètres du matériau. Cette relation est obtenue par la corrélation observée entre ces 2 grandeurs aux sites d'amorçage du clivage. Les auteurs ont calé les paramètres du modèle avec les essais de ténacité sur les éprouvettes SENB (Single Edge Notch Bending) à la température de -85°C. En utilisant les paramètres identifiés, la prédiction de la ténacité à la rupture pour les autres géométries (CT, MT « middle tension » et CRB « cruciform bending specimen ») est en bon accord avec les résultats expérimentaux. L'évolution de la ténacité avec la température n'est cependant pas rapportée. Ces auteurs mettent également en avant la nécessité d'écrire le modèle de rupture sous forme incrémentale pour assurer une évolution monotone croissante à la probabilité de rupture. Il est vrai que de nombreux auteurs ne discutent pas de ce point, pourtant important lorsque l'on aborde la transition ductile-fragile, car on a localement des changements de trajets de chargements avec des décharges.

On note ainsi, que de nombreux auteurs proposent de prendre en compte la germination des microfissures et la possibilité de leur émoussement pour le calcul de la probabilité de rupture par clivage. Néanmoins, les lois de germination des microfissures et les critères d'extension restent souvent phénoménologiques. Le nombre de paramètres augmente et finalement, si les paramètres ne dépendent pas de la température, il semble difficile de prédire la transition ductile-fragile.

Pour avoir des bases plus physiques aux critères de rupture, Kroon et Faleskog (2005) ont réalisé des calculs micro-mécaniques et se sont intéressés aux conditions d'extension d'un germe de clivage dans un carbure puis dans la ferrite. Ils supposent que la rupture débute par la germination des microfissures dans les carbures, mais que la microfissure peut s'arrêter dans la ferrite. La ténacité macroscopique du matériau dépend alors de la capacité de la ferrite à arrêter les microfissures. Un carbure est modélisé sous forme de cylindre de comportement élastique ; il est entouré par la ferrite de comportement élasto-viscoplastique isotrope. Ils ont effectué les calculs dynamiques pour tenir compte de la vitesse de fissuration du carbure, et ont utilisé les surfaces cohésives pour modéliser la fissuration. Ils concluent que la sensibilité du comportement de la ferrite à la vitesse de déformation joue un rôle important sur la ténacité dans le domaine de la transition ductile-fragile. Ils montrent qu'un taux de triaxialité des contraintes faible conduit à une déformation plastique équivalente plus élevée dans la ferrite. Ainsi, le niveau de contrainte dans le carbure augmente, ce qui conduit à une vitesse de fissuration plus élevée et à une pénétration dans la ferrite plus importante. Leur modélisation montre que la contrainte macroscopique à la rupture diminue lorsque le taux triaxialité des contraintes diminue.

II.5 APPROCHES POLYCRISTALLINES DE LA RUPTURE FRAGILE

La difficulté de modéliser la rupture dans le domaine de la transition ductile-fragile, peut être liée au mécanisme de la rupture, à la microstructure critique (dans les aciers bainitiques) ou à la description du matériau. Ce dernier point a conduit certains auteurs (Mathieu, 2006 et Libert, 2007) à proposer une modélisation micro-mécanique s'appuyant sur les mécanismes de plasticité à l'échelle cristalline. Ils prennent ainsi en compte l'hétérogénéité des champs mécaniques provenant de cette échelle qui peut être source de dispersion des contraintes à la rupture. Nous présentons d'abord les modèles de comportement polycristallin, puis leur application dans le domaine de la rupture par clivage.

II.5.1 Généralités sur les modèles polycristallins

Plusieurs types de modèles polycristallins prennent en compte le glissement plastique sur les systèmes de glissement. Il existe des modèles phénoménologiques dont la variable de déformation est le glissement sur chaque système, γ^s, et des modèles basés sur la théorie continue des dislocations qui utilisent les densités de dislocations moyennes sur les systèmes de glissement, ρ^s. Dans tous les cas, les modèles comportent :

- un critère de plasticité basé sur le critère de Schmid et la cission résolue τ^s, qui peut s'écrire dans le cas général :

$$f(\underset{\sim}{\sigma}) = f(\tau^s) = \left|\tau^s - x^s\right| - r^s = 0 \qquad \text{(II.27)}$$

avec $\tau^s = (\underset{\sim}{\sigma}.\vec{n}^s).\vec{m}^s$, $\vec{n}^s, \vec{m}^s$ la normale et la direction du système de glissement *s*, x^s, r^s les termes d'écrouissage cinématique et isotrope.

- une loi d'écoulement :

$$\dot{\gamma}^s = F(x^s, r^s) \qquad \text{(II.28)}$$

- les lois d'évolution des termes d'écrouissage qui introduisent une matrice d'écrouissage faisant apparaître les composantes d'auto-écrouissage H_{ss} et les composantes d'écrouissage latent H_{su} ($s \neq u$).

Les modèles diffèrent dans l'écriture de ces lois et dans la définition de la matrice d'écrouissage.

Le modèle phénoménologique de Cailletaud et Méric est obtenu par l'écriture des équations des lois de comportement élastoviscoplastiques macroscopiques à l'échelle des systèmes de glissement. Ainsi, la loi d'écoulement prend la forme d'une loi de Norton avec seuil :

$$\dot{\gamma}^s = \left\langle \frac{f(\tau^s)}{K} \right\rangle^n \operatorname{sign}(\tau^s - x^s) \qquad \text{(II.29)}$$

avec $\langle H \rangle = H$ si $H \geq 0, \langle H \rangle = 0$ sinon. Les lois d'écrouissage s'écrivent :

$$\dot{r}^s = \left(r^s - r_0\right) \sum_u H_{su} \left|\dot{\gamma}^u\right| \quad r^s(0) = r_0 \qquad \text{(II.30)}$$

$$x^s = c\alpha^s \quad \text{et} \quad \dot{\alpha}^s = \dot{\gamma}^s - d\left|\dot{\gamma}^s\right|\alpha^s \quad \alpha^s(0) = 0 \qquad \text{(II.31)}$$

Les coefficients *c* et *d* sont les paramètres du matériau.

II.5.2 Modèle CristalECP

Le modèle de comportement utilisé dans ce travail, est le modèle CristalECP développé dans le code de calculs par éléments finis ABAQUS à l'Ecole Centrale Paris. Dans ce modèle l'écrouissage isotrope et l'écrouissage cinématique sont définis par :

$$x^s = 0 \quad r^s = \tau_c^s \qquad \text{(II.32)}$$

La loi d'écoulement ne s'écrit pas en fonction du critère. Elle se présente sous la forme d'une loi exponentielle et peut être écrite pour les métaux cubiques centrés (C.C.) au-delà de la

température de transition de comportement, et les métaux cubiques à faces centrées (C.F.C) pour un système de glissement s :

$$\dot{\gamma}^s = \dot{\gamma}_0^s \left(\frac{\tau^s}{\tau_c^s} \right)^n \quad \text{si} \quad f(\tau^s) = 0, \dot{f} = 0 \tag{II.33}$$

avec $\dot{\gamma}_0^s$ et n des paramètres du matériau décrivant sa sensibilité à la vitesse de déformation. Les expressions de $\dot{\gamma}_0^s$ et n peuvent être écrites en utilisant la théorie du mouvement thermiquement activé des dislocations :

$$\dot{\gamma}_0^s = \rho_m^s b^2 \nu_D \, exp\left(\frac{-\Delta G_0}{k_B T} \right) \tag{II.34}$$

$$n = \frac{\tau_\mu^s V^*}{k_B T} \tag{II.35}$$

avec, ρ_m^s la densité de dislocations mobiles, b la norme du vecteur de Burgers, ν_D la fréquence de Debye, ΔG_0 l'énergie d'activation relative au franchissement des obstacles, k_B, la constante de Boltzmann, T la température absolue, τ_μ^s la contrainte athermique et V^* le volume d'activation.

Le modèle CristalECP décrit l'écrouissage en fonction des densités de dislocations sur les différents systèmes de glissement. Il est basé sur le modèle de Tabourot. La cission critique sur le système de glissement s peut être reliée à la densité de dislocations sur chaque système de glissement. :

$$\tau_c^s = \tau_0 + \mu b \sqrt{\sum_u a^{su} \rho^u} \tag{II.36}$$

où a^{su} est une matrice d'interaction entre différents systèmes de glissement s et u, τ_0 est la contrainte de frottement de réseau fonction de la température, μ est le module de cisaillement et ρ^u est la densité de dislocations sur le système de glissement activé u.

La loi d'évolution de la densité de dislocations est donnée par une équation de bilan faisant intervenir un terme de création des dislocations, et un terme d'annihilation :

$$\dot{\rho}^s = \frac{1}{b} \left(\frac{1}{L^s} - 2 y_c \rho^s \right) \left| \dot{\gamma}^s \right| \tag{II.37}$$

où L^s est le libre parcours moyen des dislocations et y_c une distance caractéristique d'annihilation. En prenant en compte seulement l'interaction dislocation-dislocation, le libre parcours moyen peut s'écrire en fonction de la densité de dislocations sur les autres systèmes et de la taille de grains :

$$\frac{1}{L^s} = \frac{1}{D_{grain}} + \frac{\sqrt{\sum_{u \neq s} \rho^u}}{K} \tag{II.38}$$

K, est un paramètre du matériau et D_{grain} est le diamètre du grain. La loi d'écrouissage s'écrit en fonction de la matrice d'écrouissage, h_{su} :

$$\dot{\tau}_c^s = \sum_u h_{su} \dot{\gamma}^u \tag{II.39}$$

La définition de τ_c^s permet d'écrire :

$$h_{su} = \frac{\mu a^{su}}{2} \frac{1}{\sqrt{\sum_t a^{st} \rho^t}} \left(\frac{\sqrt{\sum_{t \neq s} \rho^t}}{K} - 2 \frac{y_c}{b} \rho^u \right) \tag{II.40}$$

On trouvera les détails de ce modèle dans Erieau et al. (2004) ou Libert (2007). Le modèle est capable de modéliser les trois stades de la courbe d'écrouissage d'un monocristal qui est orienté pour le glissement simple et est écrit dans le cadre des transformations finies. Il est implémenté dans le logiciel élément finis *ABAQUS* (en utilisant le sous-programme *UMAT*) au laboratoire MSSMat de l'Ecole centrale Paris. Les équations constitutives sont intégrées avec un schéma d'intégration de type Euler explicite.

II.5.3 Application au clivage

Mathieu (2006) et Libert (2007) proposent d'étudier la rupture par clivage des aciers bainitiques à l'aide de la plasticité cristalline afin d'introduire les hétérogénéités de déformation dues à la microstructure cristalline et d'expliquer l'évolution des paramètres de Beremin avec la température. Leurs prédictions sont basées sur l'hypothèse que la rupture du matériau est pilotée par l'extension d'une micro-fissure présente dans un carbure. Les difficultés sont essentiellement la représentation de la microstructure complexe de la bainite et le comportement à basse température.

I.1.1.1 Approche de Mathieu (2006)

Pour représenter la microstructure bainitique, Mathieu (2006) a utilisé des aggrégats polycristallins en 3D avec des grains polyédriques. Pour tenir compte des lattes de ferrite comportant des carbures (cémentite) en amas et formant la banite, il a utilisé une démarche de transition d'échelles. Le monocristal de ferrite est modélisé à l'aide de la loi cristalline phénoménologique de Cailletaud. Le comportement du « monocristal » de bainite est obtenu par une méthode d'homogénéisation. La démarche est résumée à la figure II-27. Les simulations du comportement global de la microstructure et l'approche traitant de la rupture par clivage, sont effectuées sur un agrégat de 200 grains. Le tirage aléatoire des orientations est basé sur une texture isotrope.

Le critère de rupture est écrit à l'échelle microscopique à partir des hypothèses suivantes :

- les carbures sont l'origine de l'amorçage des défauts ;
- l'amorçage des défauts est provoqué à partir d'un certain niveau de déformation plastique équivalente cumulée ;
- les plus petits carbures n'interviennent pas dans la rupture ;

– la propagation de défaut amorcé dans la matrice ferritique environnante est pilotée par un critère de type Griffith. Une fois qu'un micro-défaut s'étend dans la matrice ferritique environnante, la rupture finale est obtenue.

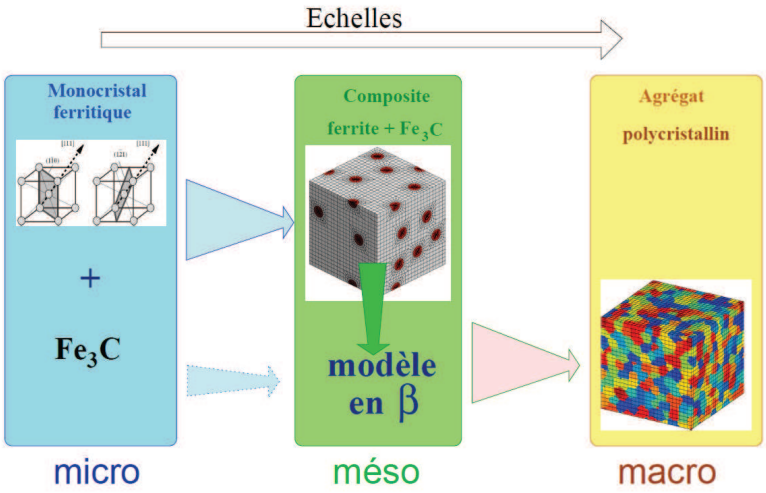


figure II-27 : Représentation des trois échelles de modélisation (Mathieu, 2006)

Mathieu tire aléatoirement plusieurs tailles de carbures aux points d'intégration de son agrégat polycristallin ; il conserve la taille du plus gros carbure tiré, si celle-ci est inférieure à une taille maximale au-delà de laquelle il suppose que la microfissure sera créée précocement et s'émoussera avant que le critère d'extension soit atteint. A ce carbure est associée une contrainte critique σ^{grif} suivant le critère de Griffith pour une fissure de type «penny-shape». Dans un premier temps, l'énergie de surface équivalente γ_p est constante. La rupture finale se produit dès qu'au niveau d'un point d'intégration, la contrainte principale maximale atteint la contrainte critique σ^{grif} (pour un niveau de déformation plastique minimale ε_p^{min}). La contrainte à rupture de l'élément de volume est la contrainte principale maximale macroscopique, Σ_i^R à l'instant de rupture.

Il a réalisé N simulations, en faisant varier à chaque fois la distribution de taille des défauts par un nouveau tirage aléatoire. En triant les contraintes critiques macroscopiques dans l'ordre croissant, la probabilité de rupture en fonction de la contrainte macroscopique à la rupture Σ_i^R est calculée à l'aide de l'expression suivante :

$$P_r\left(\Sigma^R \leq \Sigma_i^R\right) = \frac{i-0,5}{N} \tag{2.41}$$

où i est le rang de la simulation classée dans l'ordre croissant des contraintes macroscopiques à rupture. Il a effectué des simulations pour des comportements à différentes températures, entre -60°C et -150°C et différents taux de triaxialité des contraintes. La figure II-28 montre la probabilité de la rupture en fonction de la contrainte macroscopique Σ_1.

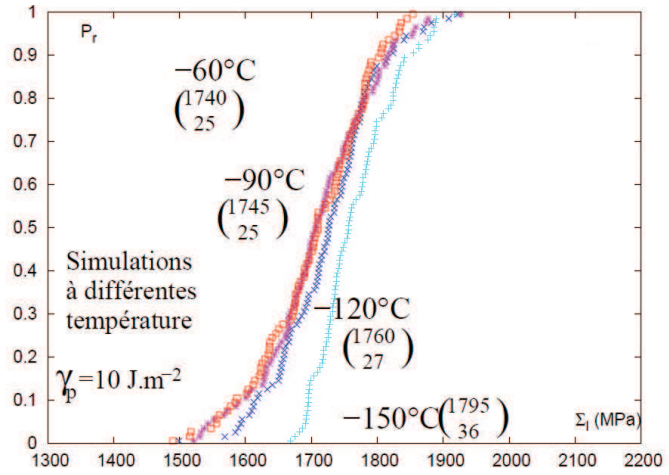


figure II-28 : Probabilité de rupture en fonction de la contrainte macroscopique Σ_1 aux différentes températures pour un taux de triaxialité des contraintes égale à 2, en supposant une contrainte de Griffith indépendante de la température (les paramètres d'un modèle de Weibull sont identiques) (Mathieu, 2006)

Les résultats montrent que lorsque l'énergie de surface effective γ_p est considérée constante, la probabilité de rupture du volume élémentaire ne dépend pas significativement de la température, mais elle diminue quand même avec la température. Les résultats obtenus avec le modèle de Beremin (voir la discussion sur Haušild, 2002 ou Tanguy et al., 2005) indiquent que dans cette gamme de température, les paramètres varient effectivement peu avec la température mais que l'on a une tendance à l'augmentation de la contrainte de normalisation σ_u avec la température. C'est l'inverse de la tendance observée par Mathieu. Mathieu introduit donc une dépendance de γ_p à la température ; il retrouve que la probabilité de rupture élémentaire à une contrainte fixe Σ_1, est d'autant plus faible que la température est élevée (figure II-29).

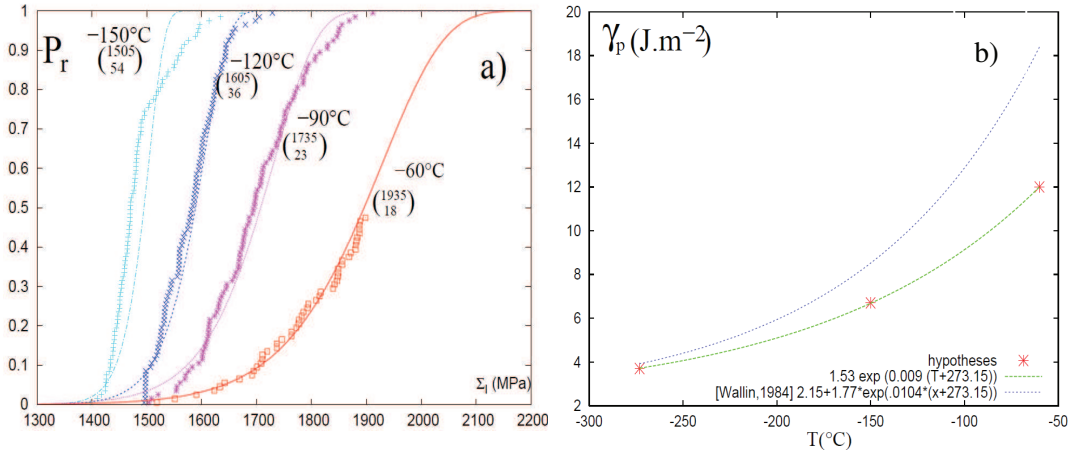


figure II-29 : (a) Probabilité de rupture élémentaire en considérant $\gamma_p=f(T)$ et un taux de triaxialité des contraintes de 2 , les paramètres d'un modèle de Beremin équivelent sont indiqués entre parenthèses (b) Dépendance de γ_p avec la température (Mathieu, 2006)

Les paramètres du modèle de Weibull sont déterminés sur les probabilités de rupture élémentaire. Mathieu (2006) constate une dépendance significative des paramètres m et σ_u avec la température. Il a relié l'augmentation de σ_u à l'évolution de γ_p qui augmente la contrainte de Griffith. On note que les paramètres de Beremin identifiés sur ces résultats ne correspondent pas

aux valeurs classiquement admises. Ces paramètres dépendent du taux de triaxialité des contraintes macroscopiques. L'application de cette démarche à la prédiction de la ténacité nécessiterait d'avoir précisément cette dépendance.

I.1.1.2 Approche de Libert (2007)

Libert (2007) a également étudié la rupture fragile d'un acier bainitique à l'aide d'une approche cristalline. Il a pris en compte les mécanismes de plasticité intervenant aux basses températures dans les métaux cubiques centrés pour obtenir la loi de comportement de la bainite. Pour ce faire, il a modifié le modèle initial CristalECP. Il a développé une loi d'écoulement basée sur le mouvement thermiquement activé des segments vis des dislocations. La contrainte d'écoulement pour activer le glissement plastique est basée sur trois termes : une contrainte due à la friction du réseau τ^s_{eff} liée aux interactions à courte distance des dislocations, une contrainte due à la présence des dislocations de la forêt τ^s_i et une contrainte pour franchir les précipités τ_0. Ces deux contraintes sont liées aux interactions à longue distance des dislocations. La somme des trois contraintes (contrainte d'écoulement) dépend de la cission effective et de la densité de dislocations locale :

$$\tau^s = \tau_0 + \frac{\tau^s_{eff}}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{\tau^{s\ 2}_{eff} + 4(\mu b)^2 \sum_u a^{su} \rho^u} \qquad \text{(II.42)}$$

Aux hautes températures, on peut négliger le terme τ^s_{eff} et la loi d'écrouissage devient celle définie par Tabourot (eq. (II.36)). Dans l'équation de l'évolution des densités de dislocations, les paramètres liés aux termes de multiplication et d'annihilation des dislocations dépendent de la température. Cette loi est celle du modèle de plasticité cristalline de Tabourot.

L'agrégat est construit à l'aide des observations EBSD (Electron Back Scattered Diffraction). Il comporte donc les informations cristallines du matériau, mais pas la géométrie tridimensionnelle des grains.

Les calculs d'agrégats polycristallins indiquent que les concentrations des champs mécaniques se situent aux interfaces entre paquets de lattes. La dispersion des contraintes augmente avec la température et avec la déformation macroscopique. Libert représente la distribution des contraintes principales maximales locales (microscopiques) par une fonction de type Gumbel (équation(2.43)) et corrèle les paramètres de la distribution avec la contrainte équivalente de von Mises macroscopique $<\sigma_{mises}>$ et la température T. La probabilité d'avoir la contrainte principale maximale σ_1 inférieure à une valeur σ à l'échelle microscopique est donc :

$$P\left(\sigma_1 < \sigma\right) = 1 - exp\left[-exp\left(-\frac{\sigma_1 - <\sigma_1>}{\alpha <\sigma_{mises}> + \beta(T)} + \Gamma'(1)\right)\right] \qquad \text{(2.43)}$$

où $<\sigma_1>=\Sigma_1$ est la contrainte principale moyenne dans l'agrégat, α et β sont les paramètres du modèle et $\Gamma'(1)$= 0.577.

Libert teste différentes formulations de la probabilité de rupture et introduit la distribution de tailles de carbures. La probabilité de rupture élémentaire est le produit de la probabilité de trouver un carbure de taille supérieure à r_c qui a une résistance σ_c, par la probabilité que la

contrainte principale σ_1 excède σ_c. La contrainte critique σ_c est donnée par l'expression de Griffith. La probabilité de rupture élémentaire s'écrit :

$$dP_{R0}\left(r_c\right) = f\left(r_c\right).P\left(\sigma_1 > \sigma_c\right) \tag{2.44}$$

où $f(r_c)$ est la distribution de taille de carbures proposée dans la littérature (Lee et al.,2002) et $P(\sigma_1 > \sigma_c)$ est la distribution des contraintes principales maximales dans l'agrégat.

En traçant la densité de probabilité de rupture élémentaire en fonction de la taille critique aux différentes températures et pour un niveau de contrainte principale maximale donné, Libert constate que l'influence des carbures intervient aux basses températures. En revanche aux températures plus élevées, ce sont les hétérogénéités mécaniques qui influencent la probabilité de rupture élémentaire (figure II-30).

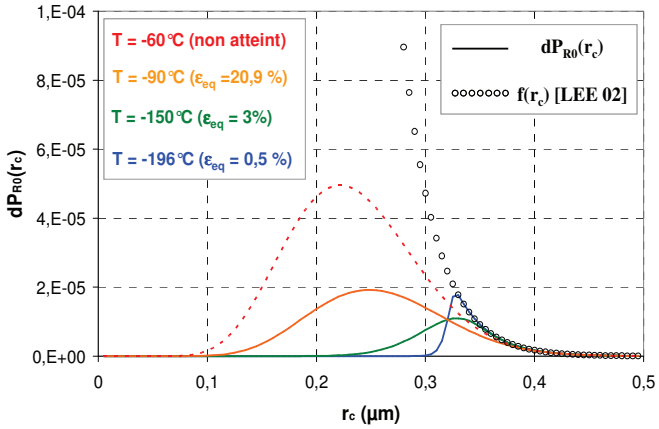


figure II-30 : Evolution de $dP_{R0}(rc)$ en fonction de T et comparaison avec la fonction densité $f(r_c)$ (Libert, 2007)

La figure II-31 montre la comparaison entre la probabilité de rupture élémentaire identifiée par Libert (2007) et celle de Beremin. La probabilité de rupture élémentaire P_{R0} est une fonction croissante de la contrainte principale maximale moyenne $<\sigma_1>$. Mais pour une valeur fixée de $<\sigma_1>$, les valeurs de P_{R0} augmentent avec la température. Cela ne semble pas cohérent avec les résultats expérimentaux.

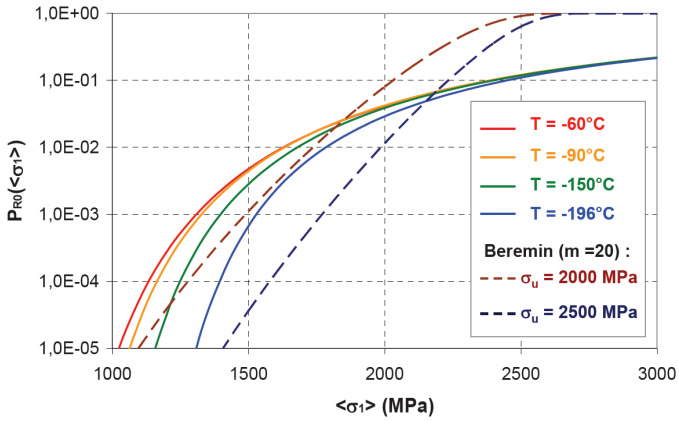


figure II-31 : Probabilité de rupture élémentaire en fonction de $<\sigma_1>$ pour différentes valeurs de T (Libert, 2007)

Libert propose alors d'exprimer la probabilité de rupture élémentaire en fonction de la déformation plastique équivalente macroscopique et a déterminé les valeurs de $<\sigma_1>$ et $<\sigma_{mises}>$ correspondant à plusieurs états de déformation plastique équivalente macroscopique $<\varepsilon_{peq}>$. La figure II-32 montre l'évolution de P_{R0} en fonction de $<\varepsilon_{peq}>$. Dans ce cas, les valeurs de la probabilité de rupture élémentaire P_{R0} diminue lorsque la température augmente à chargement fixe.

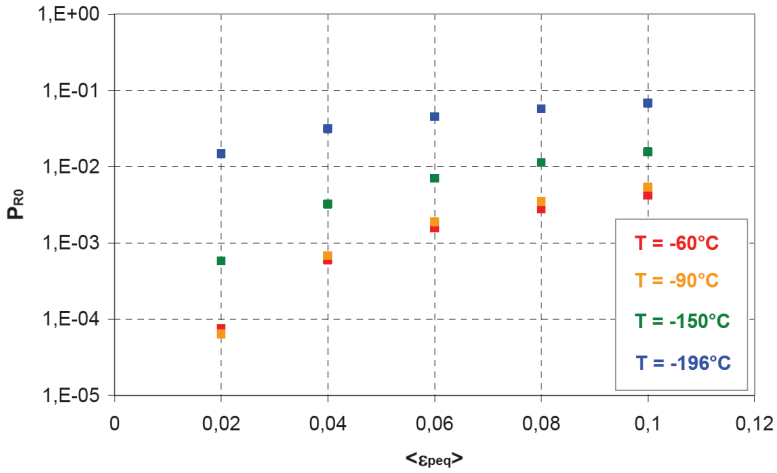


figure II-32 : Évolution de P_{R0} en fonction de $<\varepsilon^p_{eq}>$ (Libert, 2007)

Ces deux travaux (Mathieu, 2006 et Libert, 2007) sont basés sur la même hypothèse, en ce qui concerne le mécanisme de rupture par clivage de la bainite : l'extension de la microfissure présente dans un carbure, provoque la rupture du volume élémentaire. La bainite est modélisée comme un agrégat polycristallin. Mathieu ne représente pas la microstructure en lattes, mais une microstructure synthétique en volume par des cellules de Voronoï. Libert représente la morphologie en lattes de la bainite mais seulement dans un plan. Dans les deux études, les carbures ne sont pas représentés, étant de taille très faible par rapport aux grains. L'identification du comportement du monocristal est réalisée par des démarches différentes. Le durcissement par les carbures est inclus dans le comportement cristallin.

Une différence essentielle entre les 2 études concerne la démarche pour déterminer la probabilité de rupture élémentaire ; Mathieu considère l'agrégat polycristallin comme une éprouvette. Il teste ainsi *N* agrégats polycristallins, dans lesquels l'origine de la dispersion est la position des carbures de taille variable dans les agrégats. Il obtient la probabilité de rupture en analysant les résultats comme on le fait avec des résultats expérimentaux. Libert (2007) ne fait qu'un seul calcul par condition mécanique. Il en tire la distribution de la contrainte principale maximale. A l'aide de cette distribution et de la distribution de taille de carbure, il calcule la probabilité de rupture de l'agrégat, c'est-à-dire la probabilité de rupture élémentaire macroscopique. La question de la répartition spatiale des carbures n'est pas posée.

Récemment, Nguyen (2010) a utilisé des agrégats tridimensionnels synthétiques, mais basés sur la microstructure en lattes de la bainite, et la loi de comportement cristalline proposée par Libert. Ses résultats montrent que la contrainte principale maximale à l'échelle microscopique dépend du niveau de la contrainte d'écoulement macroscopique et donc de la déformation plastique

macroscopique. Pour ce qui concerne la rupture, il propose un modèle faisant intervenir plusieurs barrières microstructurales, lesquelles sont effectivement évoquées dans la littérature : il ne s'agit plus seulement de vérifier le critère de Griffith en un point de la microstructure. Le travail qui s'ensuit est complexe et reste à compléter.

Malgré des démarches différentes, on note que dans ces travaux, se pose le problème du choix de la variable mécanique macroscopique qui pilote la probabilité de rupture élémentaire. En effet, si on choisit la contrainte principale maximale en accord avec le modèle de Beremin-Weibull, on trouve que plus la température augmente et plus la probabilité de rupture augmente. Ce résultat n'est évidemment pas en accord avec les analyses des résultats expérimentaux qui montrent le contraire.

II.6 CONCLUSION PARTIELLE

La rupture par clivage des aciers nécessite la germination et l'extension de microfissure de type Griffith. La germination de la microfissure peut provenir de l'empilement de dislocations sur des obstacles (particule, joints de grains, autre système de glissement, …). Mais elle peut provenir d'un effet transfert de charge de la matrice plastique vers des particules élastiques. La contrainte de clivage peut être calculée par le critère de Griffith. Elle dépend de la taille de la microfissure et d'une énergie de surface effective.

Les observations montrent que les carbures se fracturent et sont à l'origine du clivage pour les aciers à bas carbone, sphéroïdisés ou non. Le nombre de carbures clivés augmente avec la déformation et diminue lorsque la température augmente. On peut considérer que la rupture par clivage est contrôlée par la distribution de taille des carbures. Si la taille des carbures est proportionnelle à la taille des grains, on observe une dépendance de la contrainte de clivage à la taille de grains. L'effet intrinsèque de la taille de grain est encore discuté.

Les premiers modèles de prédiction de la ténacité étaient basés sur le critère d'extension des microfissures, avec le modèle RKR pour l'approche déterministe et le modèle de Beremin pour l'approche probabiliste. Les critères locaux macroscopiques sont donc des critères en contrainte, et en particulier en contrainte principale maximale. Les paramètres de ces modèles étaient initialement supposés constants.

L'application de ces approches à la prédiction de la rupture dans la transition ductile-fragile montre que les paramètres ne peuvent pas être constants avec la température. Cela implique que la densité de tailles de microfissures ou le critère évolue avec la température.

Dans les aciers bainitiques, plusieurs entités microstructurales critiques sont évoquées : paquet de lattes bainitique, ancien grain austénitique, carbure, amas de carbures et inclusions (MnS). Chaque entité possède sa propre distribution de tailles. Il est envisageable que différentes populations interviennent en fonction de la température.

Cependant, on note aussi que les modèles précédents supposent que la distribution des microfissures est constante à une température fixée : la germination des microfissures et l'évolution de la densité de taille de ces microfissures au cours du chargement n'est pas prise en compte ; or, si l'on suppose que la rupture des carbures est à l'origine du clivage de l'acier, il

semble évident que la densité des microfissures va évoluer avec la déformation et la température. Ainsi, des auteurs de plus en plus nombreux introduisent la déformation dans leur modèle de prédiction du clivage. Le taux de triaxialité des contraintes est parfois introduit également pour déterminer si la microfissure peut s'émousser ou se propager.

Une autre voie pour la modélisation du clivage consiste à prendre en compte l'hétérogénéité des champs mécaniques issue de l'échelle cristalline dans la dispersion des contraintes à la rupture. Les premières modélisations sont encourageantes : elles font apparaître l'influence de la température sur la dispersion des contraintes critiques macroscopiques. Des difficultés subsistent : en particulier le choix du critère de rupture à l'échelle microscopique, et le choix des grandeurs macroscopiques critiques.

CHAPITRE III.
CARACTERISATION MICROSTRUCTURALE ET MECANIQUE DU MATERIAU

TABLE DES MATIERES

III.1 INTRODUCTION 50

III.2 MICROSTRUCTURE DU MATERIAU 50

III.2.1 Matériau 50

III.2.2 Traitement thermique 51

III.2.3 Analyse microstructurale 52

III.3 CARACTERISATION MECANIQUE 55

III.3.1 Introduction 55

III.3.2 Essais de traction simple 55

III.3.3 Essais SENT 59

III.4 FRACTOGRAPHIE 65

III.4.1 Observations 65

III.4.2 Etat mécanique au site d'amorçage 69

III.5 CONCLUSION PARTIELLE 70

III.1 INTRODUCTION

Nous avons vu que les mécanismes de rupture par clivage étaient mieux connus et moins discutés pour les aciers à bas C ou à carbures sphéroïdisés que pour les aciers bainitiques ou martensitiques. De plus, la microstructure des premiers est plus simple à représenter que celles des seconds. Ainsi, nous avons choisi d'étudier le comportement et la rupture d'un acier sphéroïdisé, afin d'avoir quelques éléments expérimentaux sur lesquels baser notre étude numérique de la rupture fragile. Ce chapitre présente la caractérisation expérimentale de la microstructure du matériau, ainsi que son comportement mécanique et son comportement à la rupture.

L'acier choisi est un matériau initialement ferrito-perlitique. Des traitements thermiques sont effectués afin d'avoir des carbures sphériques au sein d'une matrice ferritique. L'analyse microstructurale consiste à caractériser la distribution de taille des grains, ainsi que celle des carbures. Ces analyses sont réalisées à l'aide de diverses techniques comme la microscopie optique, la microscopie électronique à balayage et les analyses EBSD (Electron Back Scattered Diffraction).

Le comportement mécanique et la rupture de l'acier sphéroïdisé sont étudiés à l'aide d'essais de traction simple et d'essais de ténacité. Ces essais sont réalisés dans une gamme de température entre -196°C et la température ambiante. Les essais de traction simple nous permettent d'étudier l'évolution de la limite d'élasticité et de l'écrouissage en fonction de la température. Les essais de ténacité réalisés sur les éprouvettes SENT (Single Edge Notched Tensile) donnent des éléments concernant l'évolution de la ténacité en fonction de la température, et le domaine de la transition ductile-fragile.

Enfin, des observations fractographiques sont effectuées sur les faciès de rupture des éprouvettes SENT pour déterminer les mécanismes de rupture et les sites du déclenchement de la rupture par clivage.

III.2 MICROSTRUCTURE DU MATERIAU

III.2.1 Matériau

Le matériau étudié est un acier de type C35R fourni en barre de 40×40 mm par IMS France. La composition chimique massique standard de l'acier est présentée dans le tableau III-1. Il comporte 0.35% massique de carbone.

C	Mn	Si	P	S	Cr	Ni	Mo	Fe
0.35	0.72	0.25	0.01	0.024	0.11	0.04	0.01	bal.

tableau III-1. Composition chimique massique de l'acier étudié (%)

Dans son état de réception, il est ferrito-perlitique (figure III-1) à grains équiaxes. La perlite est répartie de façon homogène au sein de la ferrite. La fraction surfacique de la perlite est obtenue par une analyse micrographique quantitative. Celle-ci est effectuée sur une micrographie optique

de 500×400 $(\mu m)^2$. Le logiciel *ImageJ*® permet d'obtenir une image binaire mettant en évidence la ferrite en blanc et la perlite en noir. La fraction surfacique de perlite mesurée ainsi est de 46%. Les masses volumiques de la ferrite et de la perlite sont proches (7716 kg/m^3, et 7575 kg/m^3). En assimilant fraction surfacique (volumique) et fraction massique, on trouve 0,35% massique de carbone, ce qui est conforme à la désignation de l'acier.

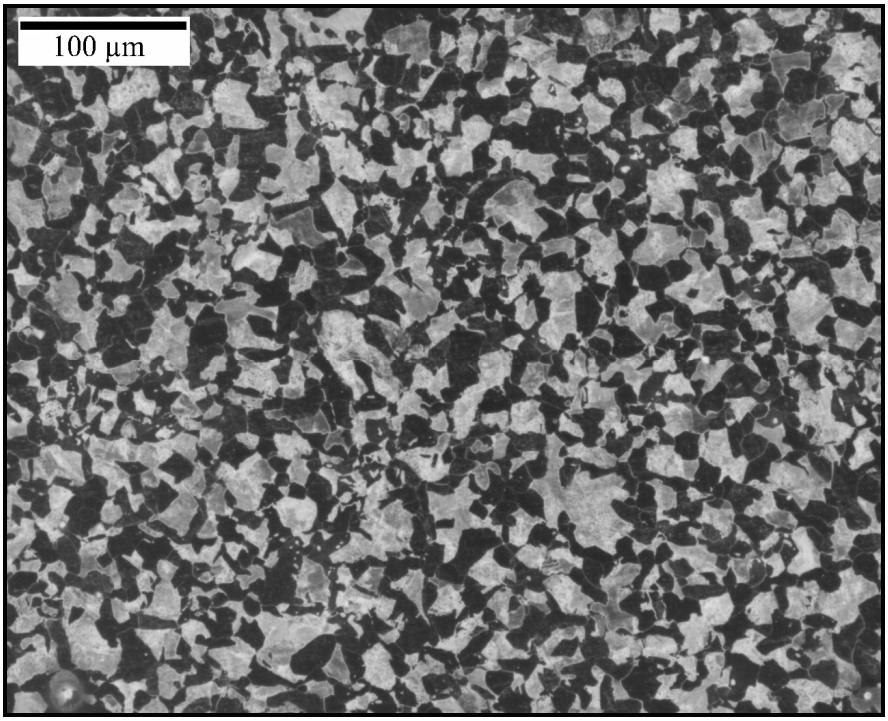


figure III-1. Micrographie optique du matériau non traité (attaque au nital 1%)

III.2.2 Traitement thermique

Une étude est réalisée sur les traitements thermiques à effectuer afin d'avoir, à partir de l'acier de notre étude, une sphéroïdisation des carbures (étude présentée en Annexe C). Le protocole retenu est le suivant :

- un premier traitement d'austénitisation à 850°C pendant 2 heures est effectué. Cette température étant supérieure au palier eutectoïde, le matériau passe d'une structure biphasée (ferrito-perlitique) à une solution solide austénitique monophasée. L'objectif est d'obtenir une répartition homogène du carbone.
- Une trempe à l'eau est ensuite réalisée.
- Un premier revenu à 460°C pendant 10 heures est ensuite pratiqué afin de permettre une précipitation fine des carbures (cémentite).
- Un second revenu à 700°C pendant 24 heures est enfin opéré afin de permettre la sphéroïdisation des carbures.

La microstructure présentée en figure III-2 montre le résultat de ces traitements thermiques.

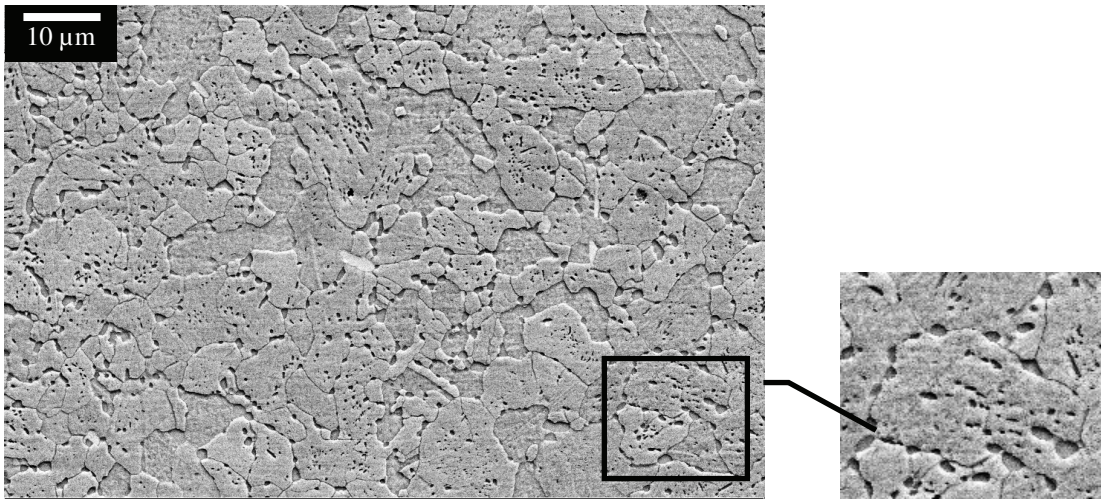


figure III-2. Microstructure du matériau étudié après le traitement thermique (microscopie électronique à balayage après attaque au nital 1%)

III.2.3 Analyse microstructurale

Les observations micrographiques réalisées avec un microscope électronique à balayage (MEB) montrent que les carbures se répartissent en 2 populations (figure III-2) : la première population des carbures est constituée par des carbures fins localisés à l'intérieur des grains de ferrite, tandis que la deuxième population de carbures se forme aux joints de grains ferritiques. Ces carbures sont à la fois plus gros et plus sphériques que ceux de la première population.

Des analyses microstructurales sont effectuées sur 9 micrographies obtenues avec la microscopie électronique à balayage. Chaque cartographie représente une surface de 70×50 $(\mu m)^2$ qui correspond à une quarantaine de grains.

En utilisant le logiciel *ImageJ*® la fraction surfacique des carbures et leur diamètre peuvent être calculés. Tout d'abord, les images sont traitées afin d'avoir une image en noir et blanc : classiquement, on réalise un seuillage de l'histogramme en niveaux de gris pour obtenir une image binaire. Avec les images prises au MEB en électrons secondaires, apparaissent en clair les carbures et les joints de grains. Ainsi, nous avons relevé manuellement, sur un calque, les particules que nous souhaitions analyser. Les petits carbures ne sont pas considérés dans les images binaires et seuls les plus gros carbures se situant aux joints de grains sont relevés. On verra par la suite que ces carbures sont plus critiques pour la rupture (REZAEE, 2009). Ces carbures seront représentés explicitement lors de la modélisation de la microstructure. Par contre, les carbures dans les grains sont souvent petits par rapport aux tailles des grains ; on ne les représentera pas dans les simulations éléments finis. Cette image avec les carbures étudiés est alors numérisée et binarisée.

Au final, la partie noire correspond aux carbures, et la partie blanche à la matrice ferritique (figure III-3). Les résultats montrent que la population des carbures aux joints de grains représente 1% en fraction surfacique. La fraction massique de cémentite étant d'environ 5%, les carbures dans les grains correspondent à 4% de la fraction surfacique.

Les diamètres équivalents des carbures sont calculés en utilisant leur surface. Cette surface (S) est obtenue par les analyses d'images. Le diamètre équivalent (d_{eq}) est calculé en utilisant l'équation de l'aire S d'un cercle ($d_{eq} = \sqrt{4S/\pi}$). Les résultats montrent que les carbures situés aux joints de grains ont des diamètres supérieurs à 1,5 µm.

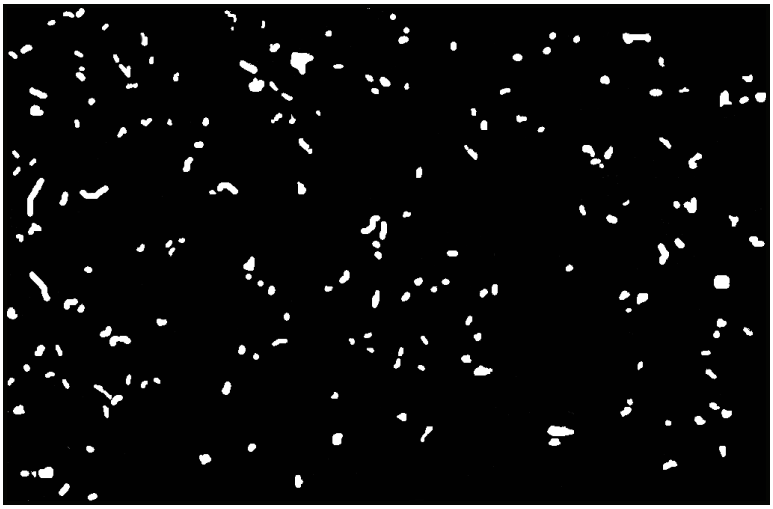


figure III-3. Image binaire de microstructure : carbures (surfaces noires) les plus gros

La distribution de tailles des carbures aux joints de grains est déterminée ; L'histogramme des tailles de carbures supérieurs à 1,5µm est obtenu avec le logiciel *ImageJ*®. La figure III-4 présente l'histogramme obtenu en cumulant les résultats des 9 cartographies de 70×50 (µm)^2.

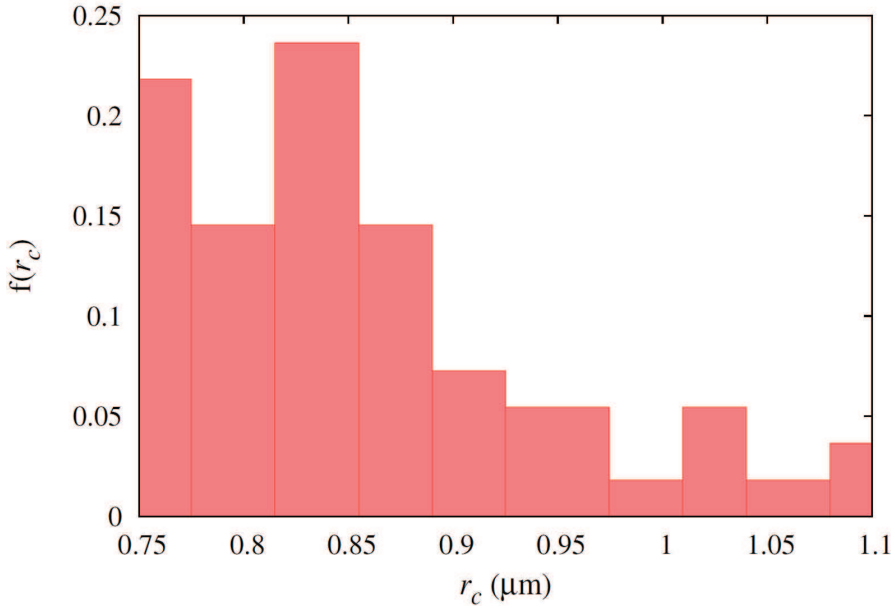


figure III-4. Histogramme des tailles de carbure aux joints de grains

La distribution cumulée des carbures de taille supérieure à une taille critique (r_c) peut être calculée. Elle sera utilisée dans les formulations de probabilité de rupture. On utilise une fonction puissance :

$$F_C(r \geq r_c) = \alpha r_c^{-\beta} \qquad \text{(III.1)}$$

Les paramètres α et β sont identifiés (pour les valeurs de r_c entre 0.75 et 1.1 µm) à 0.1 µm$^{\beta}$ et 7.3 respectivement. La figure III-5 montre la distribution cumulée de taille des carbures obtenue par les analyses d'images et la fonction identifiée sur cette distribution cumulée.

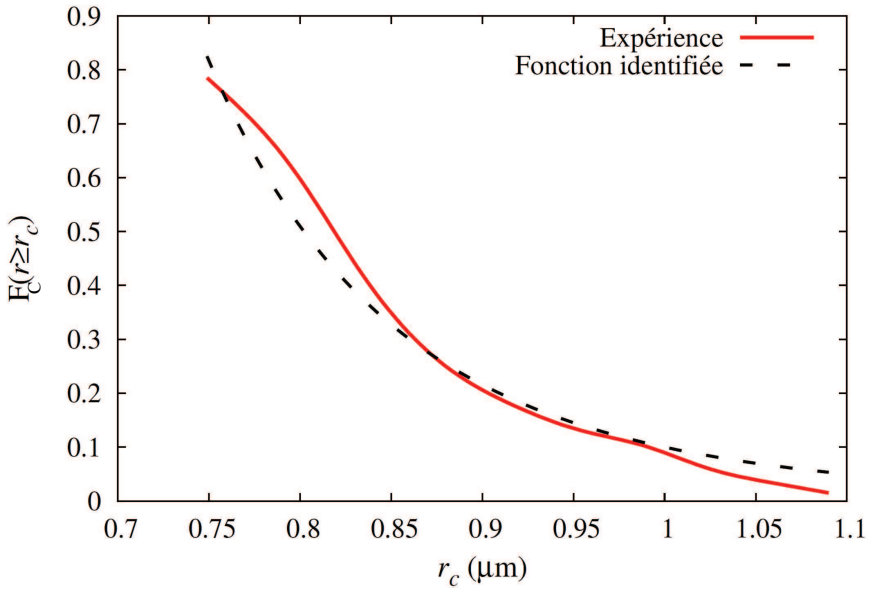


figure III-5. Distribution cumulée des carbures de taille supérieure à une taille critique

Le second paramètre microstructural étudié est la taille des grains. Afin d'obtenir une distribution de taille des grains, une cartographie EBSD (Electron Back-Scattered Diffraction) a été réalisée sur un domaine de 250×250 (µm)^2. Cette cartographie a été effectuée sur un MEB LEO équipé du logiciel *OIM*®. La distribution de tailles des grains est présentée sur la figure III-6. Elle est globalement symétrique. Le mode de cette distribution se situe à environ 10 µm.

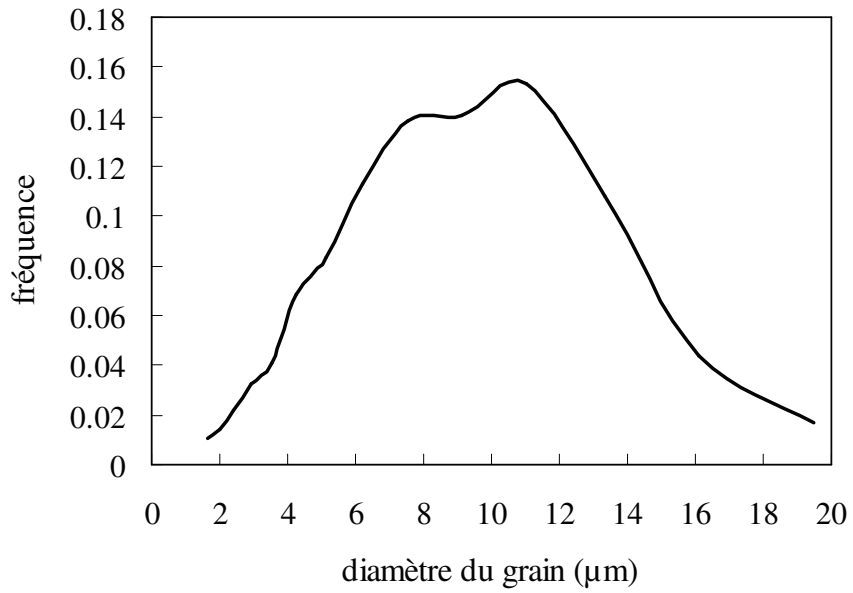


figure III-6. Distribution de taille des grains (logiciel OIM)

Les figures de pôles {001} et {011} (figure III-7) sont tracées à l'aide d'une cartographie EBSD avec le logiciel *OIM*® afin d'étudier l'isotropie du matériau. La cartographie est effectuée sur une surface de 250×250 $(\mu m)^2$. Ces figures de pôles montrent une faible anisotropie. Cela nous permettra de considérer une distribution isotrope des orientations des grains dans les simulations de microstructure.

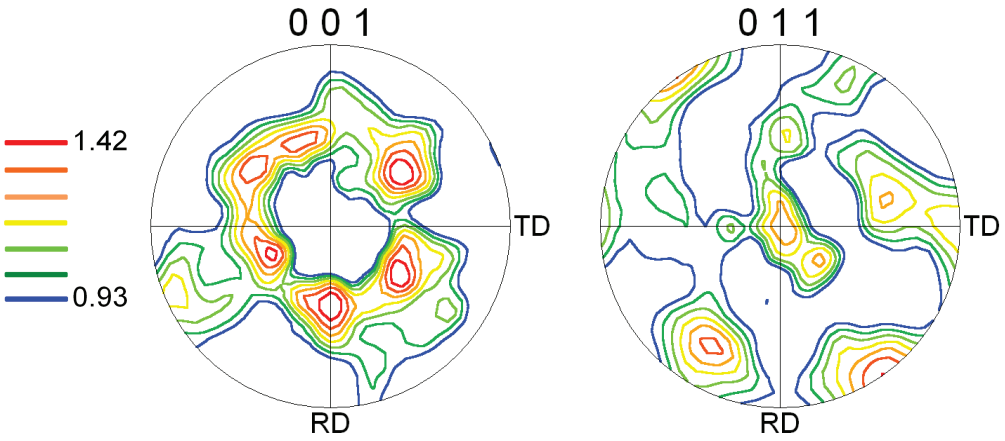


figure III-7. Figures de pôles {001} et {011} issues d'une cartographie EBSD du matériau étudié contenant 800 grains

III.3 CARACTERISATION MECANIQUE

III.3.1 Introduction

La caractérisation mécanique du matériau est réalisée en utilisant deux types d'essais :

- des essais de traction simple sur des éprouvettes plates dans une gamme de température de -196°C à la température ambiante,
- des essais de ténacité sur des éprouvettes SENT dans une gamme de température entre -196 et -40°C.

Les éprouvettes sont issues de blocs parallélépipédiques de section 40×40mm^2 ayant subi le traitement thermique de sphéroïdisation défini auparavant. Le montage et la géométrie des éprouvettes sont ceux utilisée par Libert (2003).

III.3.2 Essais de traction simple

Les essais de traction simple sont effectués aux températures de -196, -150, -120, -80, -40 et 20°C. Les éprouvettes utilisées sont plates avec une épaisseur de 2 mm, une largeur de 6 mm et une longueur utile de 32 mm (figure III-8).

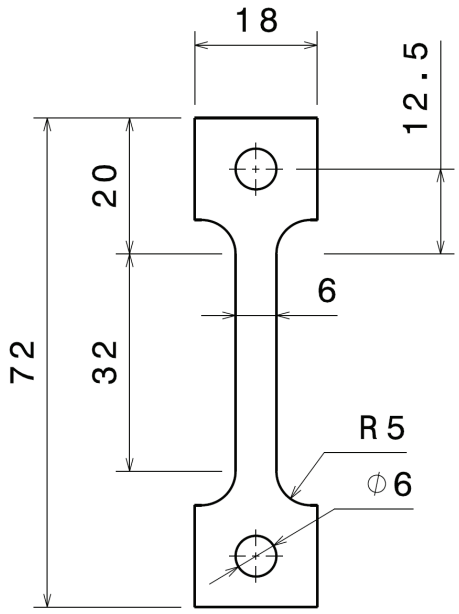


figure III-8. Eprouvette de traction monotone, épaisseur 2mm (dimensions en mm)

Les essais aux basses températures sont réalisés à l'aide d'un montage comportant une enceinte isotherme refroidie par de l'azote liquide (annexe D). Le montage est installé sur une machine de traction INSTRON de 100kN. Un élément chauffant installé dans l'enceinte et couplé à un régulateur assure le maintien de la température dans la gamme de température de -150°C à -40°C. L'essai à -196°C est réalisé sans élément chauffant.

La vitesse de déplacement de traverse est imposée. La vitesse de la traverse est déterminée afin d'obtenir une vitesse de déformation de 10^{-4} s^{-1} ou de 10^{-3} s^{-1}. Le montage utilisé ne permet pas d'installer un extensomètre sur l'éprouvette; ainsi seul le déplacement de la traverse de la machine peut être mesuré, $U_{mesuré}$. Afin d'obtenir le déplacement des têtes de l'éprouvette ($U_{éprouvette}$) et calculer la déformation, une correction de déplacement est effectuée en utilisant la raideur du montage (K_m) et la force mesurée (F) à chaque instant :

$$U_{éprouvette} = U_{mesuré} - F / K_m \qquad \text{(III.2)}$$

La raideur du montage est calculée dans la partie linéaire de la courbe. Le module de Young du matériau est fixé à 210GPa (sa valeur a été vérifiée lors d'un essai de traction à 20°C sur une éprouvette équipée de jauges de déformation). Cette raideur est quasiment constante avec la température et sa valeur est de 11 kN/mm. Les courbes conventionnelles de traction sont présentées sur la figure III-9 pour toutes les températures.

Les courbes conventionnelles de traction (figure III-9) montrent un pic et un palier de Lüders au début de la plasticité. Ce phénomène devient plus important lorsque la température diminue. La figure III-10 montre l'évolution de la limite d'élasticité supérieure (contrainte du pic) et inférieure (contrainte du palier de Lüders) en fonction de la température. On observe une forte augmentation de la limite d'élasticité pour les températures inférieures à -40°C. La limite d'élasticité entre -196 et -120°C est une fonction quasi-linéaire de la température, tandis qu'aux températures plus élevées (au delà de -40°C) la limite d'élasticité tend vers un palier qui n'est

pas atteint ici. Cette évolution est caractéristique des aciers de structure cubique centrée ; elle est une autre manifestation de la transition ductile-fragile de ces matériaux (voir chap. I).

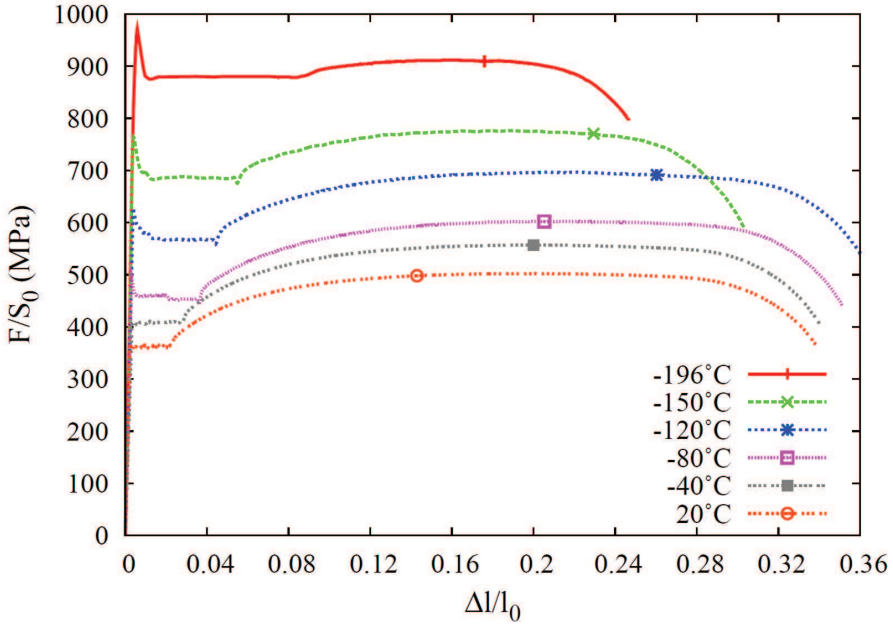


figure III-9. Courbes conventionnelles de traction à $10^{-4}s^{-1}$

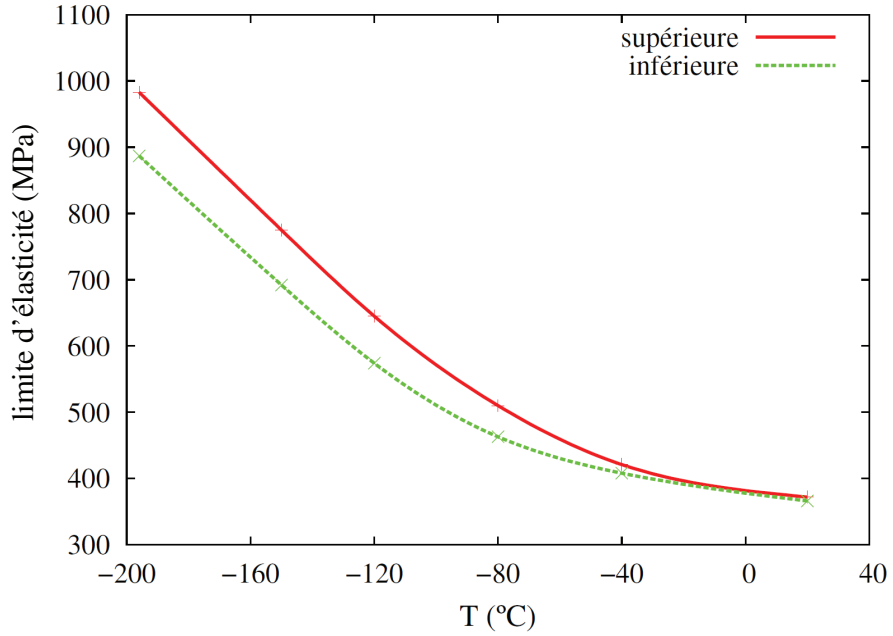


figure III-10. Evolution des limites d'élasticité en fonction de la température

Des essais de traction simple à -150°C et à -40°C sont menés à $10^{-3}s^{-1}$ pour étudier la sensibilité du matériau à la vitesse de déformation. Ces températures correspondent aux deux domaines de variation de la limite d'élasticité avec la température. Les résultats sont présentés sur la figure III-11 pour -150°C, et -40°C. La sensibilité à la vitesse de déformation n'est pas notable pour ces températures et cette variation de vitesse de déformation.

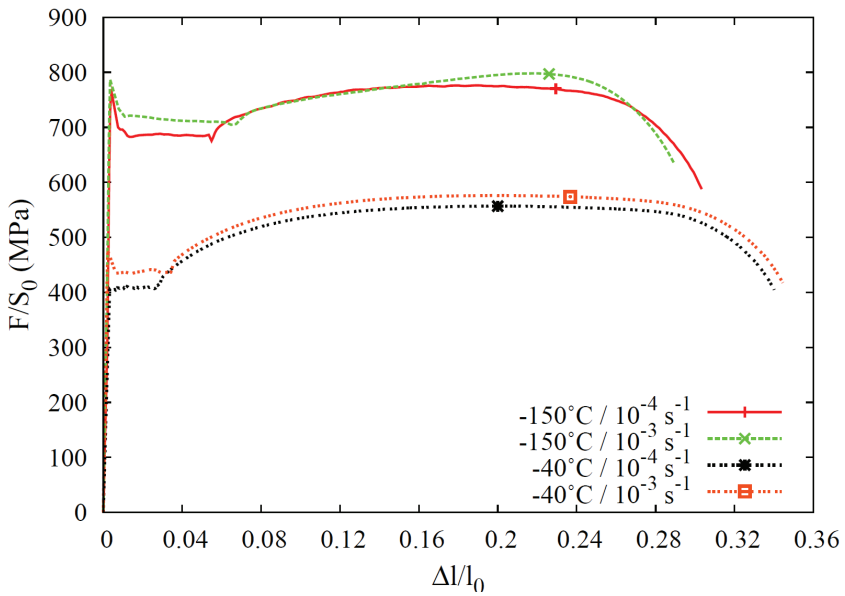


figure III-11. Courbes conventionnelles de traction – influence de la vitesse de déformation.

Le crochet de traction et le palier de Lüders résultent du comportement intrinsèque du matériau dû à l'ancrage des dislocations par des atomes de soluté, mais également d'effets de structure (Belotteau, 2009). La prise en compte de cet effet dans la loi de comportement n'est pas l'objet de ce travail. On identifie une loi d'écrouissage isotrope de type Ludwik sur les courbes de traction simple :

$$\sigma_{eq}(T) = \sigma_{0H}(T) + K_H(T)\left(\varepsilon_{eq}^{p}\right)^{n_H(T)} \qquad \text{(III.3)}$$

où σ_{0H} est la limite d'élasticité et K_H et n_H sont les paramètres à identifier. Les paramètres sont identifiés dans la partie de la courbe se situant entre la fin du palier de Lüders et la striction. Les identifications sont réalisées sur les courbes rationnelles de traction. La figure III-12 présente les courbes rationnelles de traction avec les lois identifiées.

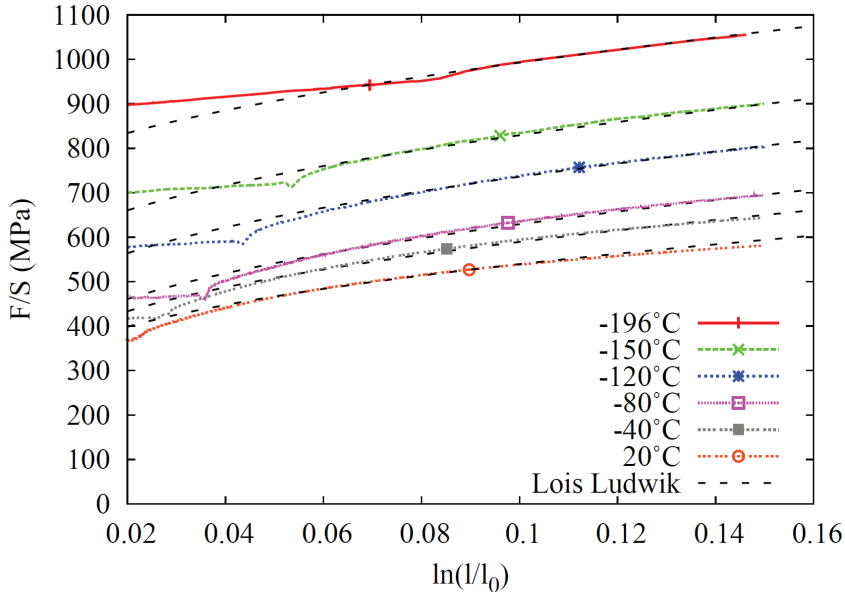


figure III-12. Lois de Ludwik identifiées à partir des courbes rationnelles de traction simple

Les paramètres de la loi de Ludwik en fonction de la température sont indiqués dans le tableau III-2. Les paramètres K_H et n_H représentent l'écrouissage du matériau ; ces paramètres diminuent lorsque la température augmente.

Température	Limite d'élasticité (σ_{0H})	K_H	n_H
°C	MPa	MPa	-
-196	759	1003	0.62
-150	558	982	0.55
-120	447	972	0.52
-80	333	926	0.49
-40	306	845	0.47
20	264	756	0.46

tableau III-2. Paramètres σ_{0H}, K_H et n_H de Ludwik en fonction de la température

III.3.3 Essais SENT

Les essais de ténacité sont réalisés sur des éprouvettes SENT (Single Edge Notched Tensile). Le montage utilisé pour réaliser des essais à basse température est celui qui a permis les essais de traction simple. Il ne permet pas de tester des éprouvettes de largeur importante et nous impose la géométrie SENT. La figure III-13 montre la géométrie de l'éprouvette SENT utilisée. L'épaisseur de l'éprouvette est B_N =6 mm, la profondeur initiale de l'entaille a= 7,5 mm et la largeur W vaut 15 mm. Le rapport de a/W est égal à 0,5 et la hauteur de l'éprouvette H est 40 mm. Aucune préfissure de fatigue n'est réalisée. Cependant, l'entaille est réalisée par électro-érosion avec un rayon de 100 µm. Cette entaille sera par la suite assimilée à une fissure. En effet, des calculs ont montré que cette approximation était raisonnable (Libert, 2003).

Les essais sont conduits aux températures de -196, -150, -120, -80, -40°C. La rupture de l'éprouvette à -40°C est totalement ductile ; on n'a donc pas réalisé d'essais à des températures plus élevées. Les essais sont effectués pour deux éprouvettes à -150°C, deux éprouvettes à -196 et -120°C et une éprouvette à -80 et -40°C.

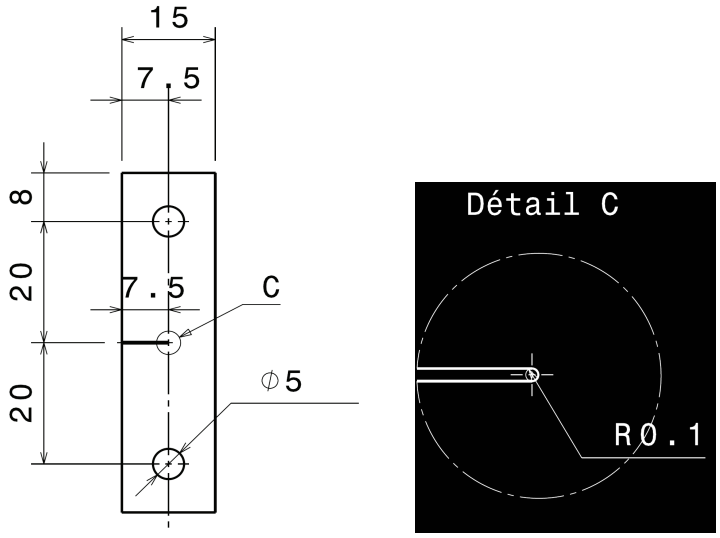


figure III-13. Géométrie de l'éprouvette SENT (dimensions en mm)

L'essai est à vitesse de déplacement de traverse imposé. La vitesse de déplacement de la traverse doit être calculée afin d'obtenir une gamme de vitesse de déformation donnée en fond d'entaille. Pour ce faire, un calcul par éléments finis en 3D est réalisé. Le maillage et les conditions aux limites utilisés dans le calcul sont présentés à la figure III-14. Un quart d'éprouvette est modélisé en prenant en compte les symétries du problème. Les éléments utilisés sont de type C3D8 (élément linéaire avec 8 noeuds) et la taille du maillage à la pointe de la fissure est approximativement 200×200 $(\mu m)^2$. Le maillage dans l'épaisseur est crée par l'extension du maillage de surface. Le déplacement est imposé sur la ligne centrale de la goupille modélisée par un secteur angulaire de comportement élastique. Le comportement du matériau est considéré élasto-plastique à écrouissage isotrope, en utilisant la courbe de traction rationnelle obtenue à -196°C. Les calculs sont réalisés dans le cadre des transformations finis.

La vitesse de déplacement imposée à l'éprouvette est déterminée pour avoir une vitesse de déformation entre 10^{-4} et $10^{-3}s^{-1}$ pour une gamme de déformation plastique équivalente entre 10 et 40% à la pointe de la fissure. La courbe force-déplacement obtenue par ce calcul, ainsi que l'évolution de la déformation et la vitesse de déformation à la pointe de l'entaille sont présentées sur la figure III-15. Ces 2 grandeurs sont calculées en faisant la moyenne sur trois éléments devant l'entaille. La vitesse de déplacement imposée à la goupille pour atteindre une vitesse de déformation entre 10^{-4} et $10^{-3}s^{-1}$ à la pointe de fissure est de 0.021 mm/min.

La raideur du montage doit être prise en compte afin de calculer la vitesse de déplacement de la traverse. Dans la partie linéaire du comportement, l'éprouvette et la machine sont équivalentes à deux ressorts en série, de raideur $K_{ép}$ pour l'éprouvette et K_m pour le montage. Ainsi, la vitesse de déplacement de la traverse est :

$$v_{traverse} = (K_m + K_{ep})/K_m . v_{ep} \qquad \text{(III.4)}$$

où v_{ep} est la vitesse de déplacement de l'éprouvette (c'est-à-dire la vitesse mesurée sur les goupilles), $v_{traverse}$ est la vitesse de déplacement de la traverse.

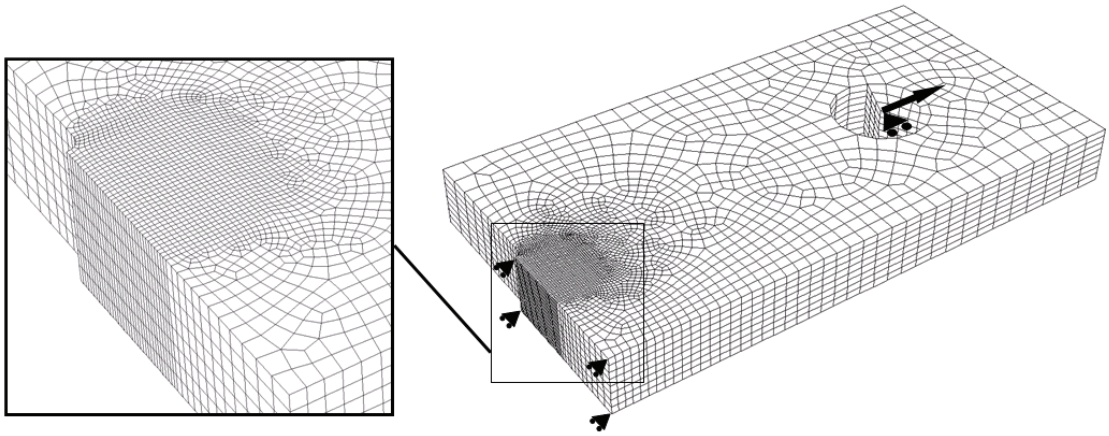


figure III-14. Maillage et conditions aux limites utilisés – éprouvette SENT

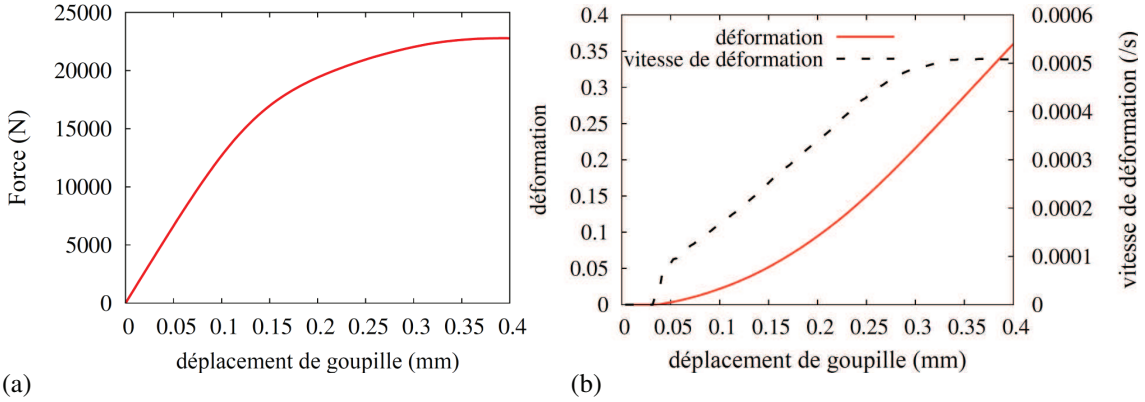


figure III-15. Courbe force-déplacement de la goupille (a) déformation plastique équivalente et vitesse de déformation plastique équivalente moyennes à la pointe de la fissure (b)

La raideur de l'éprouvette est calculée par la simulation éléments finis dans la partie linéaire de la courbe force-déplacement de la goupille. Cette raideur est de 100 kN/mm. La raideur du montage est considérée identique à celle calculée dans les essais de traction. En effet, une grande partie de la raideur du montage est due à la longueur de la tige de traction (Annexe D). Cette valeur, calculée précédemment est de 11kN/mm qui est environ 10 fois plus faible que celle des éprouvettes. Ainsi, la vitesse de déplacement de la traverse à imposer est donc de 0.21 mm/mn.

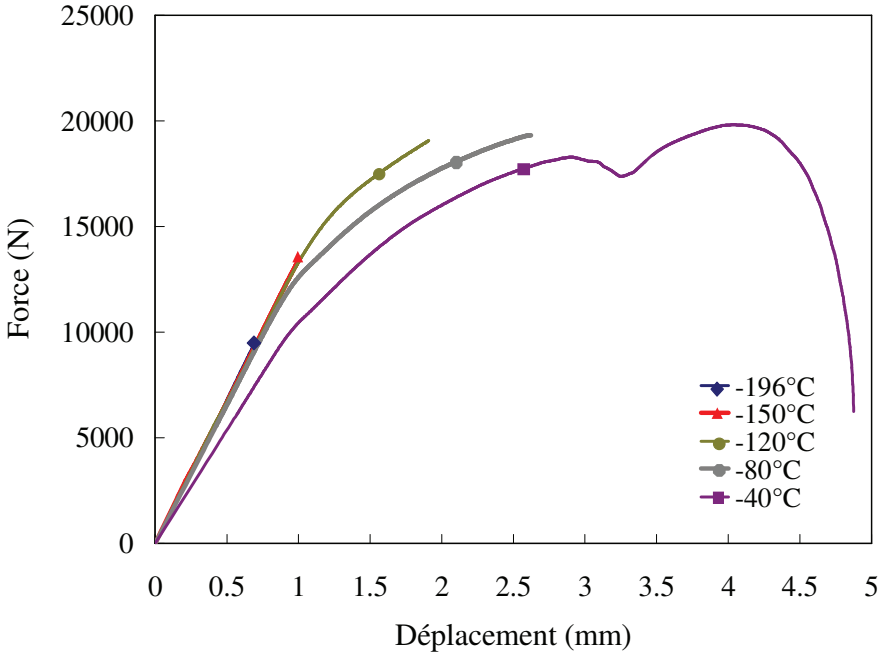


figure III-16. Courbes force -déplacement de traverse pour différentes températures

La figure III-15 montrent les courbes force-déplacement de la traverse pour les températures de -196, -150, -120 et -80°C. La courbe obtenue à -40°C présente une pente initiale plus faible qu'aux autres températures et une perturbation qui indique des problèmes de mise en place de l'éprouvette ; ces résultats ne sont pas utilisés par la suite, d'autant que la rupture est totalement ductile à cette température. La figure III-17 montre un exemple des courbes force-déplacement

pour deux éprouvettes sollicitées à -120°C. Les résultats sont reproductibles en termes de comportement, seule la rupture ne se produit pas au même instant. Les valeurs de force et de déplacement de la traverse à la rupture sont présentées dans le tableau III-3.

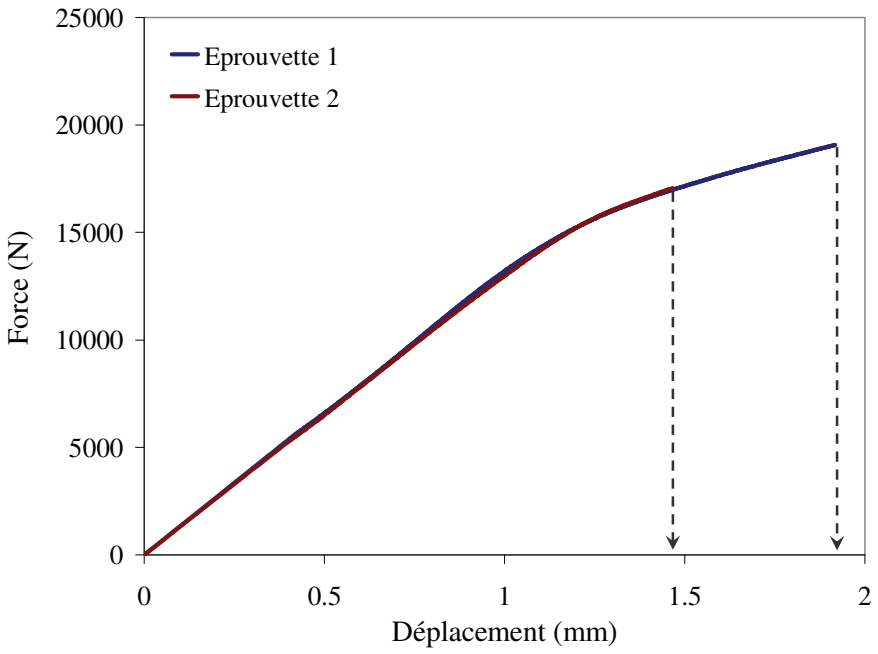


figure III-17. Reproductibilité : courbes force-déplacement pour deux éprouvettes sollicitées à -120°C

Température °C	Eprouvette	Force N	Déplacement mm
-196	A4	9528	0.69
-196	A2	10540	0.80
-150	A3	13350	0.98
-150	B5	14090	1.06
-120	A1	17060	1.46
-120	A5	19070	1.92
-80	B2	19330	2.62

tableau III-3. Valeurs de force et de déplacement de goupille à l'instant de la rupture pour les éprouvettes SENT

Afin d'obtenir les courbes force-déplacement de la goupille, on corrige les courbes brutes en utilisant la raideur du montage. Les courbes force-déplacement de goupille obtenues par les calculs éléments finis et celles des résultats expérimentaux corrigés sont en bon accord, dans la partie linéaire utilisée pour l'identification de la raideur du montage, mais également dans la partie non linéaire (figure III-18).

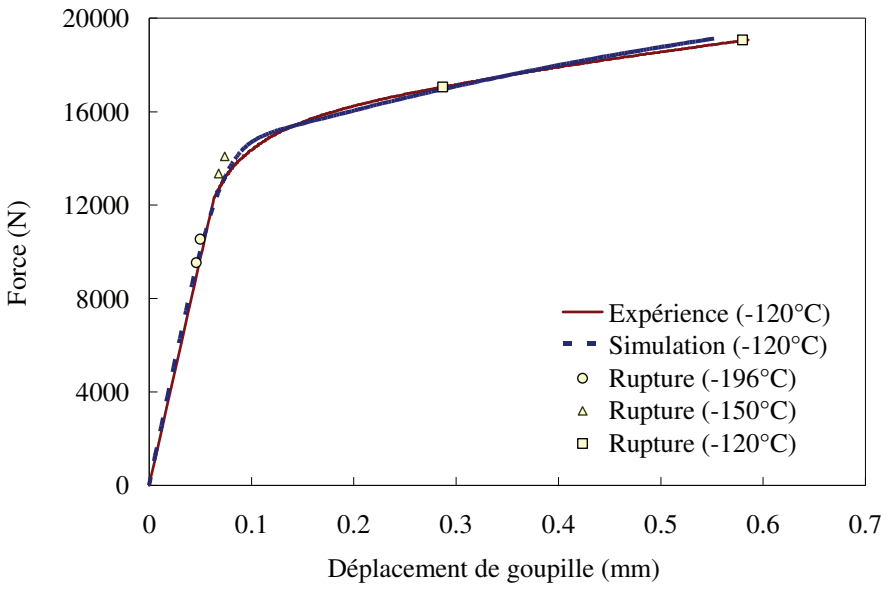


figure III-18. Courbes de traction des éprouvettes SENT ; comparaison simulation éléments finis/expérience

Des calculs ont montré que l'entaille semi-circulaire de rayon 100µm pouvait être traitée avec une bonne approximation comme une fissure (Libert, 2003). Pour déterminer la ténacité à l'amorçage, on utilise l'intégrale *J*. On peut décomposer cette intégrale en deux parties :

$$J=J_{el}+J_{pl} \tag{III.5}$$

où J_{pl} est la partie plastique et J_{el} est la partie élastique. Cette dernière est donnée par :

$$J_{el}=\frac{K_I^2}{E(1-\nu^2)} \tag{III.6}$$

où K_I représente le facteur d'intensité des contraintes (mode I), *E* est le module de Young et *v* est le coefficient de Poisson. Pour une éprouvette SENT, on a :

$$K_I=\frac{F}{B_N W}f(a/W) \tag{III.7}$$

où *F* est la force appliquée et *f* est une fonction qui dépend de la géométrie de l'éprouvette. Cravero et Ruggieri (2007) proposent une fonction polynomiale qui est illustrée à la figure III-19 en fonction de *H/W (H,* la hauteur de l'éprouvette). Cette fonction est très peu sensible aux valeurs de *H/W*. Pour la géométrie de l'éprouvette SENT utilisée dans ce travail (*H/W*= 2,66), on obtient *f* (0,5)= 3,6.

Pour la partie plastique, on peut utiliser l'expression de Rice qui relie la contribution plastique de l'énergie de déformation à la partie plastique de l'intégral *J* :

$$J_{pl}=\frac{\eta_J.A_{pl}}{B_N(W-a_0)} \tag{III.8}$$

où A_{pl} est la « partie plastique » de l'aire sous la courbe force-déplacement et η_J est un paramètre sans dimension. Cravero et Ruggieri (2007) montrent que les valeurs de η_J dépendent de l'écrouissage *n* et du rapport de *a/W* avec *n* défini par l'équation suivante :

$$\frac{\varepsilon_{eq}^{p}}{\varepsilon_0} = \left(\frac{\sigma_{eq}}{\sigma_0}\right)^n \qquad \text{(III.9)}$$

où $\varepsilon_{eq}^{p}, \sigma_{eq}$ sont les équivalents de von Mises du tenseur des déformations plastiques et des contraintes, σ_0 et ε_0 sont la contrainte et la déformation à la limite du domaine d'élasticité en uniaxial et n est l'exposant de l'écrouissage. Pour le C35R, n varie entre 5 et 6 aux différentes températures. En utilisant la figure III-20 on obtient la valeur de 2.2 pour le paramètre de η_J .

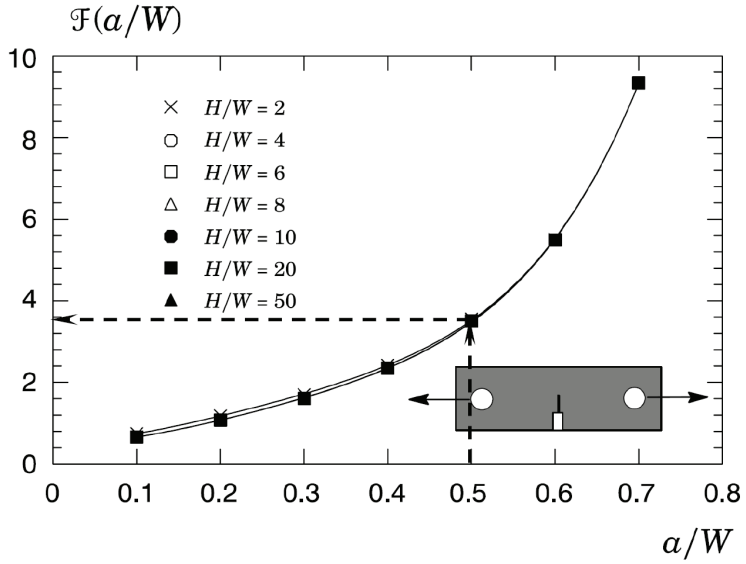


figure III-19. Fonction *f*(*a/W*) pour différentes valeurs de *H/W* (Cravero et Ruggieri, 2007)

Les valeurs de *J* à la rupture, J_c, sont calculées à différentes températures et sont présentées en fonction de la température sur la figure III-21 et le tableau III-4.

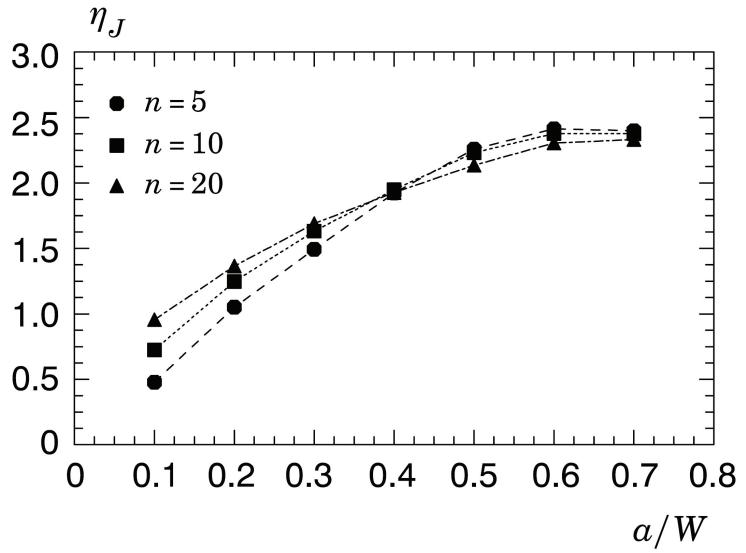


figure III-20 : Evolution du paramètre η_J en fonction de *a/W* pour les *n*=5 ou 10 ou 20 (Cravero et Ruggieri, 2007)

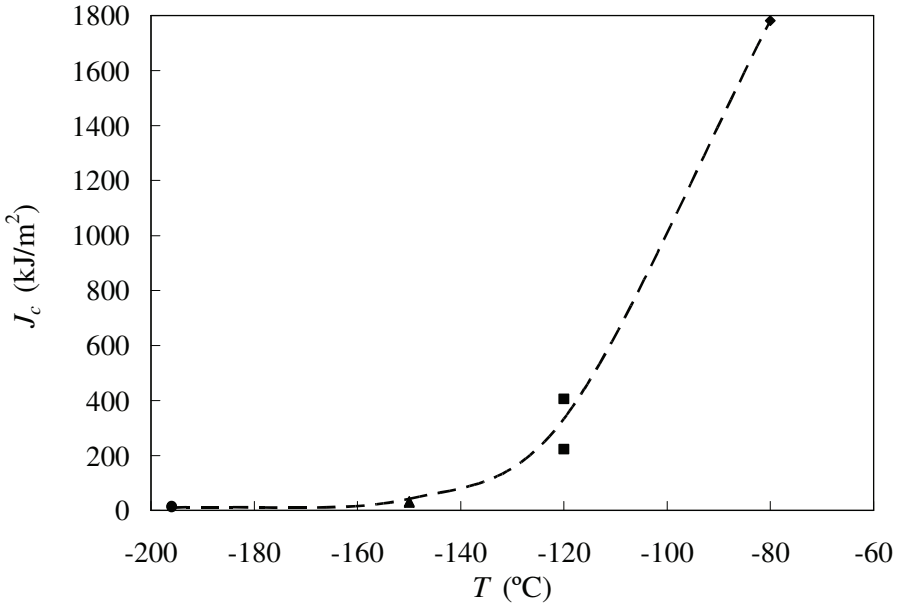


figure III-21. Evolution de la ténacité en fonction de la température

Température (°C)	Eprouvette	J_c (kJ/m^2)
-196	A4	13
-196	A2	16
-150	A3	29
-150	B5	33
-120	A1	223
-120	A5	406
-80	B2	1782

tableau III-4 : Valeurs de l'intégrale J à l'instant de la rupture pour les éprouvettes SENT

On constate que les valeurs de J_C augmentent fortement avec la température. Cette évolution est classique pour ce type d'acier, et reflète l'augmentation de la déformation plastique et l'apparition de la déchirure ductile avant le déclenchement du clivage lorsque la température augmente.

III.4 FRACTOGRAPHIE

III.4.1 Observations

La rupture des éprouvettes SENT, se produit brutalement aux températures de -196, -150, -120 et -80°C. Les faciès de rupture sont observés à l'aide d'un microscope électronique à balayage. Les éprouvettes sont rompues exclusivement par clivage aux températures de -196, -150 et -120°C. Au-delà de -120°C, on observe de la rupture ductile qui précède le clivage. La rupture inter-granulaire n'est pas observée.

La figure III-22 montre le faciès de rupture à -196°C. Aucune propagation de fissure avant le déclenchement du clivage n'est observée. Le site d'amorçage est identifié à partir du motif des lignes de cisaillement, par convergence de ces lignes vers le site d'amorçage. Ce site se situe à

130 µm de l'entaille (figure III-22). Cela correspond à environ 10 grains. Les mêmes caractéristiques sont relevées pour les ruptures à -150 et -120°C. Pour chaque température, un site principal d'amorçage est identifié qui semble être la seule origine de la rupture. Ce site se situe à environ 320 µm de l'entaille à -150°C et 350 µm de l'entaille à -120°C (figure III-23 et figure III-25).

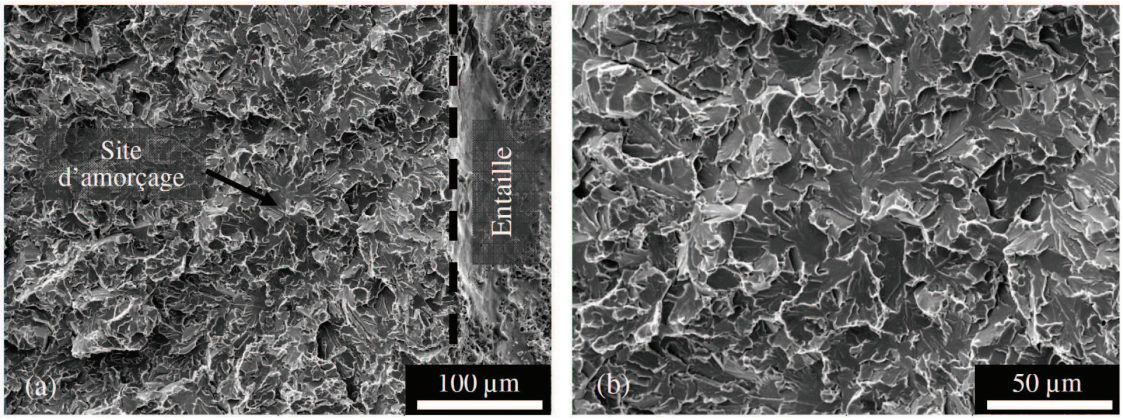


figure III-22. Faciès de rupture par clivage et site d'amorçage à -196°C (a) ; zoom sur le site d'amorçage du clivage (b)

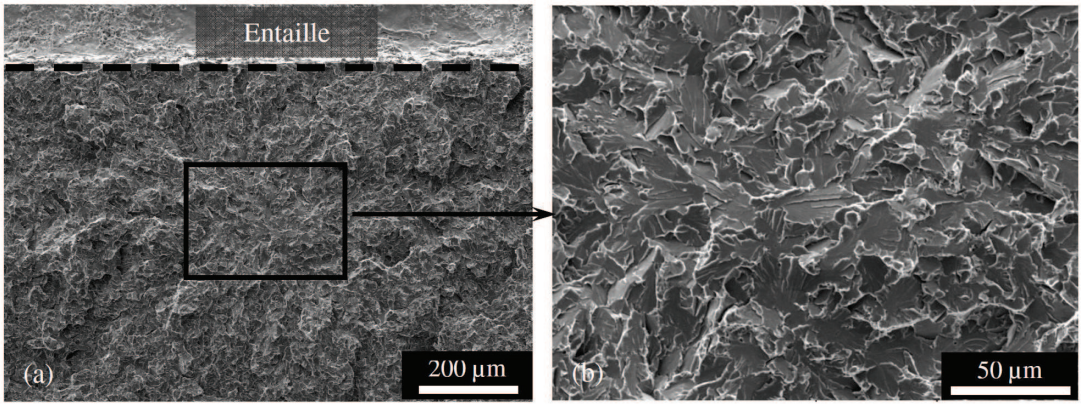


figure III-23. Faciès de rupture par clivage et site d'amorçage à -150°C (a) ; zoom sur le site d'amorçage du clivage (b)

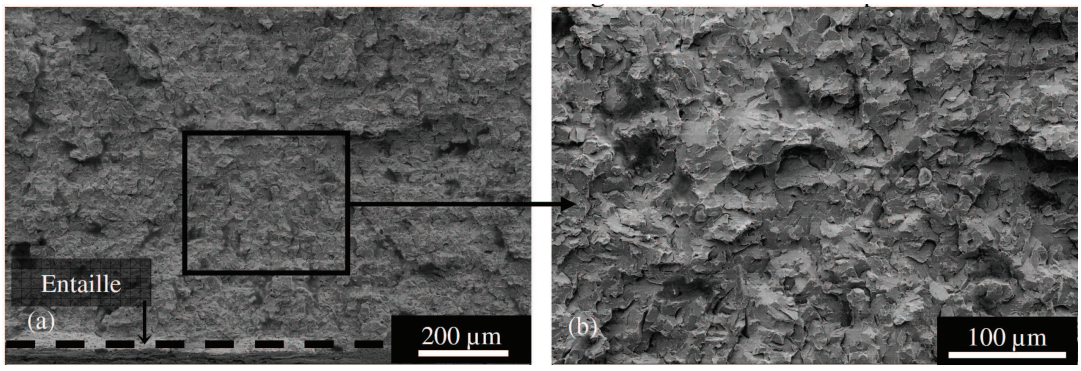


figure III-24 : Faciès de rupture par clivage et site d'amorçage à -120°C (a) ; zoom sur le site d'amorçage du clivage (b)

L'observation fractographique sur la deuxième éprouvette SENT rompue à la température de -120°C montre la présence de déchirure ductile. La partie rompue par déchirure ductile est petite ; sa longueur varie entre 50 et 100µm. Le site d'amorçage se situe à 400µm de l'entaille. A cet endroit, la longueur de la déchirure ductile est de 50µm.

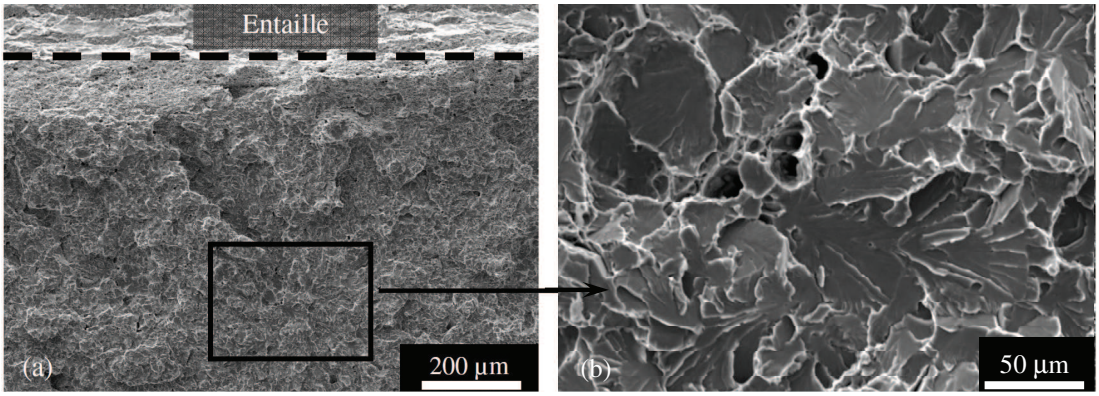


figure III-25. Faciès de rupture par clivage et site d'amorçage à -120°C (a) ; zoom sur le site d'amorçage du clivage (b)

A -80°C, la rupture ductile précède la rupture par clivage. La déchirure ductile est d'environ 300µm. La rupture par clivage est déclenchée à partir d'un site se situant à moins de 50µm de la déchirure (figure III-26).

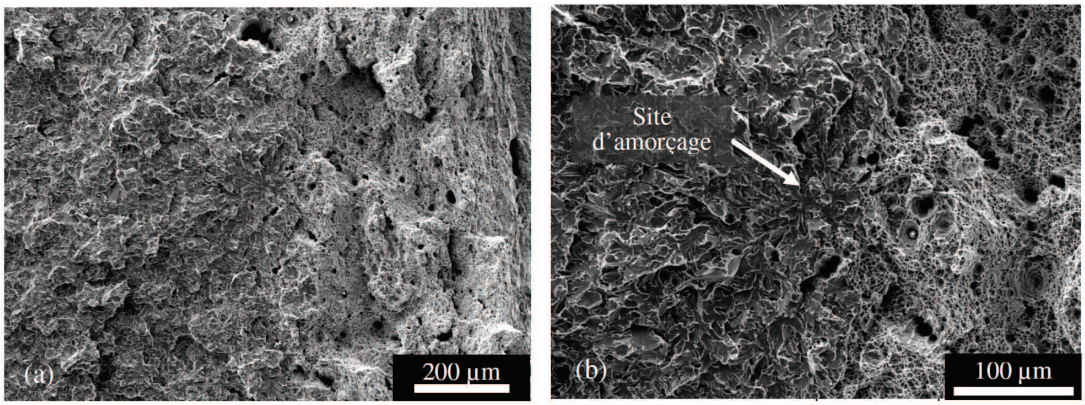


figure III-26. Présence des cupules avant le déclenchent du clivage (a), site d'amorçage du clivage (b) ; *T*=-80°C

Afin d'étudier la nature des sites d'amorçage, des observations fractographiques supplémentaires sont effectuées autour des sites d'amorçage aux température -196 et -150°C. Deux types de particules sont observés sur les faciès de rupture à proximité des sites : les carbures et les sulfures de manganèse. La figure III-27 montre la présence des inclusions de sulfure de manganèse et des carbures à la température de -196°C. Les carbures présents sur le site d'amorçage ont rompu et ont formé une micro-fissure (figure III-27(a,b,c)). Les inclusions de sulfure de manganèse sont décollées de la matrice ferritique et ont formé des cavités (figure III-27 (d)). Malgré leur présence, les inclusions ne semblent pas être l'origine de la rupture.

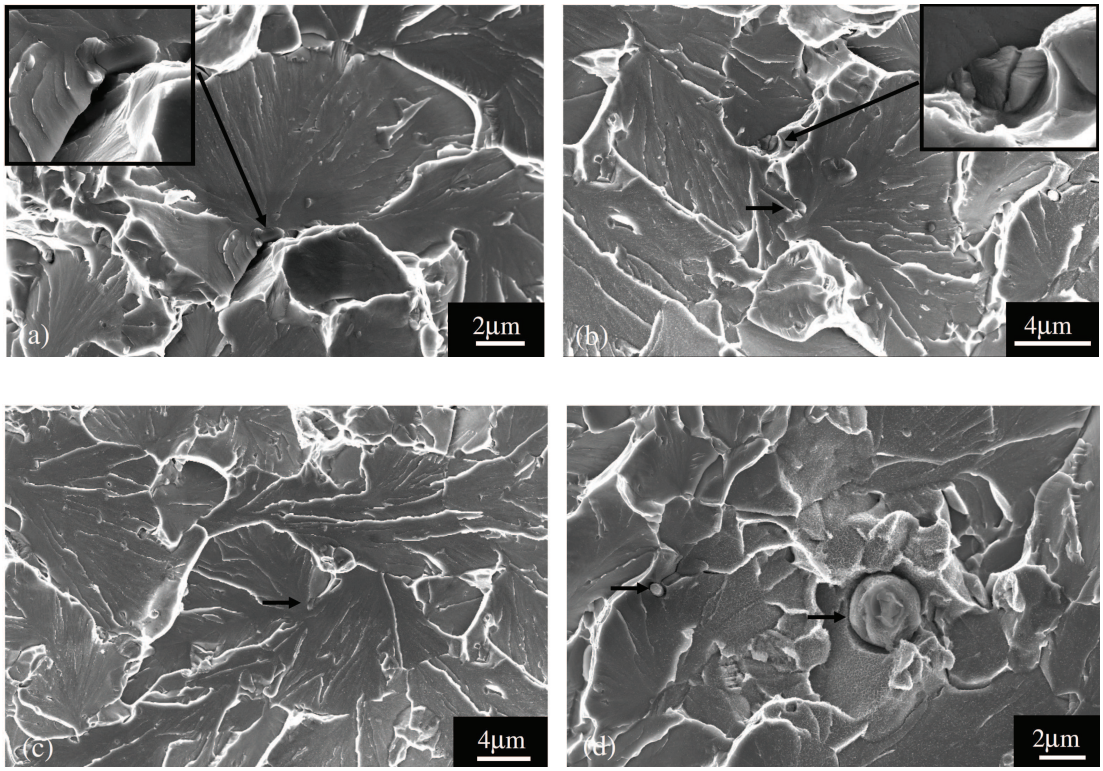


figure III-27 : Sites d'amorçage en présence de carbure fissuré (a), (b) et (c) ; Inclusions de sulfure manganèse qui forment des cavités (d) à la température de -196°C (les flèches montrent les inclusions rompues ou décollées)

A la température de -196°C, les micro-fissures dans les carbures peuvent être l'origine de fissures dans le grain (figure III-28).

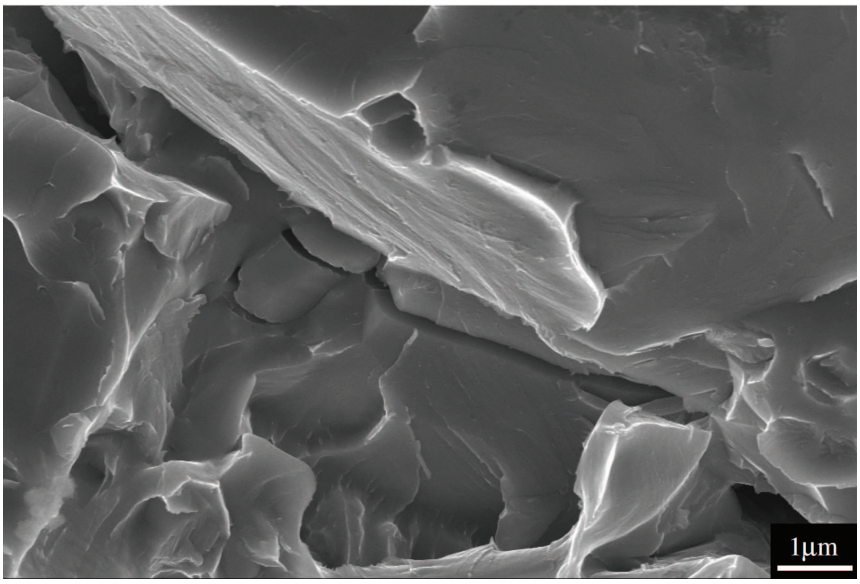


figure III-28 : Carbure fissuré et propagation de cette fissure dans le grain ferritique (température -196°C)

La figure III-29 montre les cavités de sulfure de manganèse autour du site d'amorçage sur le faciès de rupture d'une éprouvette testée à -150°C. Ici, les cavités sont à l'origine de fissure dans le grain. Ces fissures se sont arrêtées après quelques micromètres de propagation dans le grain (figure III-29(a)) ou ont été arrêtées par un joint de grain (figure III-29(b)).

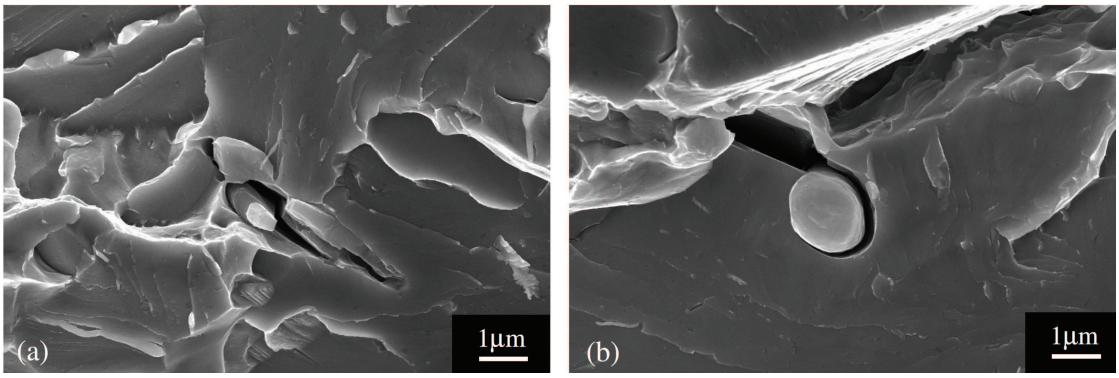


figure III-29 : Cavités autour des inclusions de sulfure de manganèse et fissures créées à partir des ces cavités stoppées dans le grain(a) ou sur un joint de grain (b) à la température de -150°C

III.4.2 Etat mécanique au site d'amorçage

Le nombre de résultats expérimentaux est faible. Néanmoins, on note que plus la température augmente, plus la distance du site d'amorçage à la pointe de fissure augmente, pour diminuer ensuite en présence de déchirure ductile. Des observations de ce type ont déjà été réalisées entre autres par Haušild et al. (2005) et Tanguy et al. (2005) dans des aciers bainitiques faiblement alliés (voir chap. II). La position de ces sites dépend de la distribution des points faibles à l'origine du clivage et de la répartition de la (ou des) variable critique qui pilote la rupture. Les calculs réalisés par éléments finis permettent d'avoir les distributions des champs mécaniques à tout instant : l'évolution de la contrainte principale maximale en fonction de la distance à l'entaille à l'instant de rupture est présentée sur la figure III-30 avec les positions des sites d'amorçage (d_c), les valeurs de la déformation plastique équivalente cumulée et du taux de triaxialité des contraintes à cet endroit. La valeur de la déformation plastique équivalente cumulée est faible aux températures de -196 et -150°C, et elle ne dépasse pas 18% à la température de -120°C. Le taux de triaxialité des contraintes au site d'amorçage à l'instant de la rupture est également faible (aux alentours de 1).

Les maximas de contrainte principale maximale se situent à des distances d_{max} entre 300 et 500µm de l'entaille (figure III-30), tandis que les sites d'amorçage se situent à des distances d_c entre 130 et 350µm de la pointe de fissure aux températures entre -196 et -120°C. Les sites d'amorçage situés à des distances $d_c < d_{max}$ ont donc subi un niveau de contrainte principale maximale peu différent de celui qui est développé au moment du déclenchement du clivage. Les sites d'amorçage très proches de la fissure sont difficiles à expliquer par un critère en contrainte principale maximale.

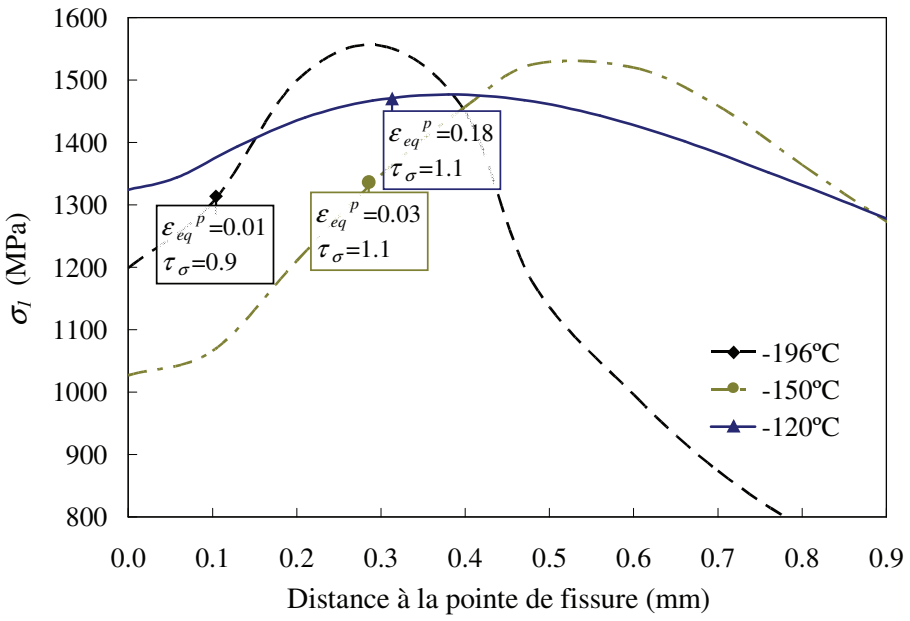
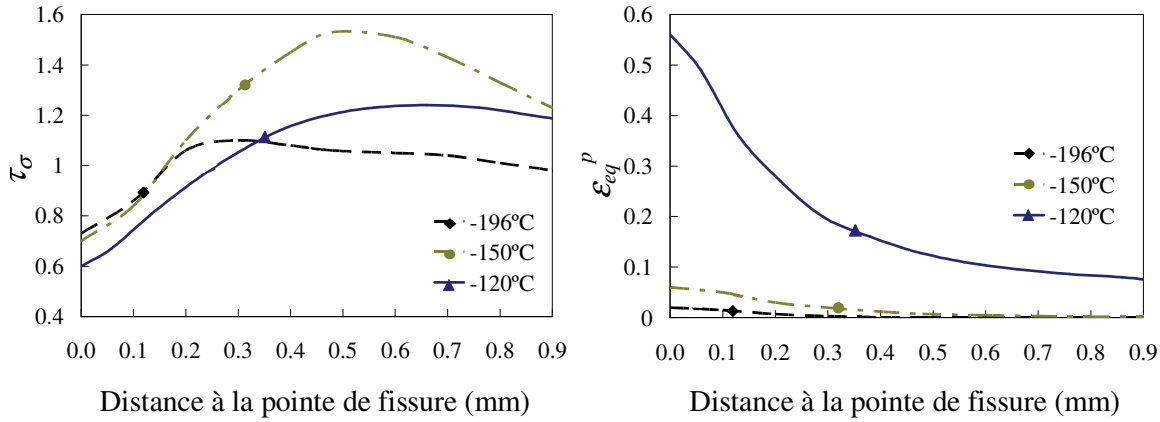


figure III-30 : Evolution de la contrainte principale maximale en fonction de la distance à l'entaille à l'instant de rupture ; les positions des sites d'amorçage, la déformation plastique équivalente cumulée et le taux de triaxialité des contraintes sont indiqués

Les profils du taux de triaxialité des contraintes et de la déformation plastique équivalente cumulée à l'instant de rupture sont indiqués à figure III-31. Le taux de triaxialité des contraintes varie peu entre 130 et 350µm aux températures de -196 et -150°C (entre 1 et 1.2), et davantage à la température de -120°C (figure III-31(a)). La rupture est déclenchée aux chargements plus élevés à la température de -120°C et la déformation plastique équivalente est plus importante à cette température (figure III-31(b)).



(a) (b)

figure III-31 : Evolution du taux de triaxialité des contraintes (a) et la déformation plastique équivalente (b) en fonction de la distance à l'entaille à l'instant de rupture

III.5 CONCLUSION PARTIELLE

Un acier de type C35R est utilisé pour obtenir des résultats expérimentaux concernant la rupture par clivage d'un acier sphéroïdisé. Cet acier initialement ferrito-perlitique, est traité

thermiquement de sorte à obtenir des carbures globulaires. Deux populations de carbures sphériques se forment au sein de la matrice ferritique après le traitement thermique : les carbures dans les grains avec des diamètres inférieurs à 1.5 µm et les carbures aux joint de grains avec des diamètres supérieurs à 1.5 µm. Les analyses microstructurales ont permis d'obtenir la distribution de taille des carbures. La distribution de taille des grains est obtenue avec des analyses EBSD. Ces analyses montrent par ailleurs une texture cristallographique isotrope.

L'évolution de la limite d'élasticité avec la température est caractérisée par des essais de traction simple : la chute de la limite d'élasticité est observé entre les températures -196 et -80°C. Au-delà, la variation de la limite d'élasticité est moins importante. Ce résultat est classique pour les aciers cubiques centrés.

Les essais de ténacité sont réalisés sur des éprouvettes SENT afin de caractériser l'évolution de la ténacité (K_C ou J_c) dans une gamme de température entre -196 et -40°C. Aux températures de -196, -150, -120°C la rupture est brutale et la plasticité avant la rupture n'est pas importante. En revanche, à -80°C un niveau important de plasticité avec présence de déchirure ductile se produit avant la rupture ; la rupture à -40°C est totalement ductile. Les sites de déclenchement du clivage sont identifiés. Le déclenchement du clivage n'est pas multi-site. Ces mécanismes supportent bien l'hypothèse du maillon le plus faible. Il n'est pas possible d'identifier la nature du site d'amorçage, mais les observations fractographiques supplémentaires autour des sites de rupture montrent la présence de deux types de particules dans cette zone : les inclusions de sulfure de manganèse et des carbures.

L'état mécanique au site d'amorçage montre que les maximums de contrainte principale maximale se situent après les sites d'amorçage à l'instant de rupture aux températures de -196 et -150°C. Ils se situent dans une zone relativement déformée, mais ils ne se situent pas dans la zone la plus contrainte.

CHAPITRE IV.
SIMULATIONS DE MICROSTRUCTURE

TABLE DES MATIERES

IV.1 INTRODUCTION 74

IV.2 GENERATION DE MICROSTRUCTURE 74

IV.2.1 Géométrie 74

IV.2.2 Génération des orientations cristallines 77

IV.3 ETUDE PARAMETRIQUE 79

IV.3.1 Introduction 79

IV.3.2 Maillage et conditions aux limites 79

IV.3.3 Comportements mécaniques 80

IV.4 RESULTATS DE L'ETUDE PARAMETRIQUE 81

IV.4.1 Hétérogénéité due à l'échelle cristalline 81

IV.4.2 Influence de la distribution d'orientation cristalline des grains 87

IV.4.3 Influence de la répartition spatiale des carbures 94

IV.4.4 Influence de la taille des carbures 96

IV.4.5 Influence de la morphologie des grains 97

IV.5 APPLICATION A L'ACIER C35R 98

IV.5.1 Introduction 98

IV.5.2 Paramètres indépendants de la température 99

IV.5.3 Evolution de la cission critique 99

IV.5.4 Paramètres de la loi d'évolution de la densité de dislocations 100

IV.5.5 Agrégat pseudo-polycristallin 101

IV.5.6 Résultats des identifications 102

IV.6 CONCLUSION PARTIELLE 104

IV.1 INTRODUCTION

L'étude bibliographique a montré que les approches classiques de la rupture par clivage sont parfois mises en défaut, en particulier dans la transition ductile-fragile. Si les mécanismes ou les critères de rupture peuvent être remis en cause, de récents travaux proposent de s'intéresser à l'échelle cristalline. Il s'agit donc de reprendre les approches polycristallines de la rupture par clivage utilisées pour la bainite, en les appliquant à un matériau de microstructure plus simple. En effet, la microstructure de la bainite est complexe et il n'y a pas de consensus sur les mécanismes de rupture de ce matériau, en particulier dans la transition ductile-fragile (voir chapitre I).

Dans les aciers sphéroïdisés, il est admis que la rupture par clivage est due à la rupture des carbures. Nous allons donc modéliser la microstructure de ce type de matériau, en représentant explicitement les carbures à l'origine de la rupture. Cela est possible car dans ces aciers, les carbures et les grains sont à la même échelle. Nous présentons donc la modélisation néanmoins idéalisée, de la microstructure d'un tel acier.

Ces modélisations sont ensuite utilisées pour réaliser des calculs par éléments finis qui permettent d'obtenir la distribution des contraintes dans les carbures. Une étude paramétrique préliminaire est réalisée concernant l'influence sur cette distribution, de la géométrie de la microstructure. Une loi de comportement cristalline basée sur des résultats de la littérature est utilisée. La loi de comportement permettant de représenter l'acier C35R après traitement de sphéroïdisation est ensuite identifiée.

IV.2 GENERATION DE MICROSTRUCTURE

IV.2.1 Géométrie

La microstructure des aciers sphéroïdisés est constituée par les grains de ferrite d'orientation cristalline variable d'un grain à l'autre et les particules de carbures. Il existe 2 grandes démarches actuellement pour représenter la microstructure d'un polycristal, et obtenir un agrégat polycristallin :

- des grains polyédriques idéalisés obtenus, par exemple, à l'aide d'une partition de Voronoï. Les orientations cristallines sont tirées dans chaque grain selon une fonction de distribution d'orientation (en général isotrope) : c'est l'option choisie par Matthieu (2006). Cette démarche permet d'avoir des agrégats tridimensionnels mais suppose implicitement que les désorientations locales sont totalement aléatoires, même si dans la microstructure bainitique, des améliorations ont été apportés dans ce sens (Osipov, 2007, N'Guyen 2010).
- Des grains définis par des cartographies EBSD. Dans ce cas, les désorientations locales sont explicitement prises en compte ainsi que la géométrie des grains, ce qui peut être important dans le développement de situations critiques concernant le clivage. Ces approches posent problème pour la représentation tridimensionnelle des microtructures. En général une cartographie permet d'avoir une microstructure bidimensionnelle qui est

étendue par translation pour obtenir un agrégat pseudo-tridimensionnel nécessaire pour la loi de comportement cristalline utilisée. C'est la voie suivie par Libert (2007). Des agrégats tridimensionnels peuvent néanmoins être obtenus par polissages et cartographies EBSD successifs (Schwartz, 2010). La représentation réelle des orientations cristallines voisines prend tout son intérêt lorsque l'on peut rendre compte d'une situation particulière qui a conduit au clivage, c'est-à-dire si on peut étudier les orientations cristallines autour d'un site de clivage. Bien que l'on puisse avoir certaines informations en réalisant de l'EBSD sur une surface de rupture (Haušild et al. 2005), ces résultats expérimentaux sont encore difficiles à obtenir.

Les travaux présentés ici ayant pour objectif d'apporter des éléments sur l'influence de l'hétérogénéité cristalline sur la prédiction de la rupture par clivage, nous avons choisi de travailler sur des microstructures théoriques. Cependant, la représentation d'agrégats polycristallins tridimensionnels comportant à la fois des grains polyédriques et des particules sphériques pour une utilisation dans des calculs par éléments finis n'est pas simple. De tels agrégats ont pu néanmoins être obtenus en fin de thèse grâce à une collaboration avec S. Pascal du CEA. Quelques calculs ont été réalisés et sont présentés en annexe.

Pour l'ensemble de l'étude paramétrique, nous avons donc choisi une représentation bidimensionnelle étendue en 3D par translation. Les grains sont modélisés soit sous forme d'hexagones, soit par une partition de Voronoï. Des disques représentent les particules. Le ratio entre la taille de grain et la taille de particule est fixée à 5 et la fraction volumique des particules est fixée à 1% en relation avec l'étude microstructurale du chapitre III. La fraction volumique de carbure représentée est celle qui correspond à la population des carbures les plus gros : elle est de 1%. Les petits carbures se situant dans les grains ne sont pas représentés géométriquement. Ils interviendront dans la loi de comportement. On ne prend pas en compte la distribution de tailles des particules, qui est donc supposée monodisperse.

Les particules sont réparties aléatoirement dans la microstructure, en utilisant une fonction de tirage pseudo-aléatoire. Cette fonction utilise un algorithme basé sur la méthode de congruence linéaire qui donne une séquence de nombres répartis uniformément entre 0 et 1. Elle a été modifiée car, comme toutes les méthodes de congruence, la fonction est périodique (voir Annexe A). On suppose que les carbures sont répartis uniformément dans l'espace. Les positions des centres des particules « x » et « y » sont tirées aléatoirement selon 2 séquences indépendantes.

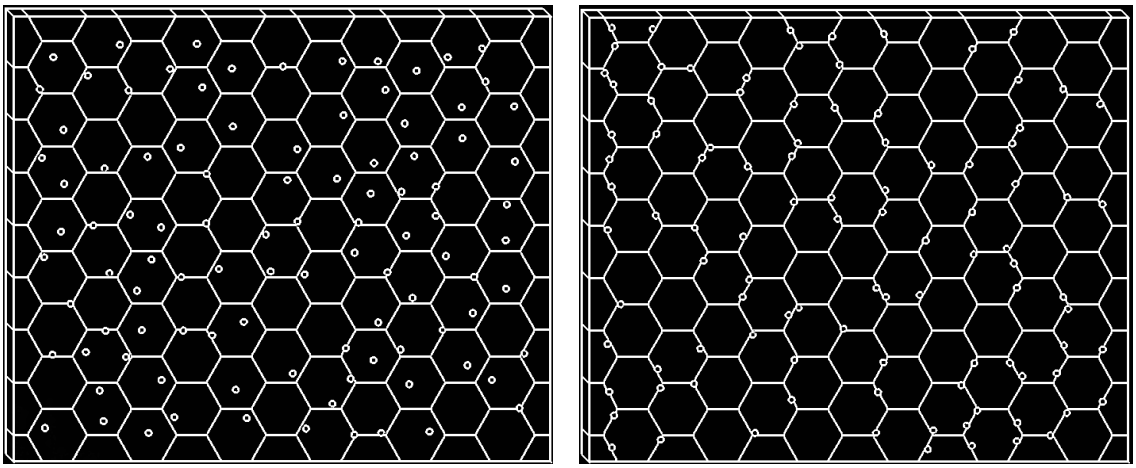
Ces géométries sont créées automatiquement dans le code *ABAQUS*® à l'aide de programmes que nous avons écrits en fortran et qui génèrent eux-mêmes des scripts en python exécutables par le code de calculs par éléments finis. L'extension tridimensionnelle de cette représentation se fait par translation dans la direction perpendiculaire au plan.

I.1.1.3 Grains hexagonaux

Les grains hexagonaux forment les grains de ferrite et les disques sont ajoutés à la microstructure pour modéliser les particules. Les paramètres d'entrée du programme de génération de microstructure sont : le diamètre du cercle circonscrit à l'hexagone, la dimension de l'agrégat, la taille et le nombre des disques, le ligament minimal entre les disques évitant d'avoir des

particules trop proches et qui seraient difficiles à mailler (et un « germe » pour le tirage aléatoire de la position des centres des particules). Le diamètre des particules par rapport au diamètre du cercle circonscrit dans l'hexagone est 0,2, et le nombre des particules est 100. Le ratio entre la largeur et la hauteur de l'agrégat par rapport au diamètre du cercle circonscrit à l'hexagone sont 18 et 14,8 respectivement. Le nombre total d'hexagones pleins ou coupés par les bords du volume est 117 (figure IV.1.a).

Nous avons vu que les carbures les plus gros se situaient essentiellement aux joints de grains dans le C35R traité (chap. II). Ainsi, une autre microstructure est construite en localisant les particules aux joints grains. Pour ce faire, la position des carbures est toujours tirée aléatoirement selon une répartition uniforme dans l'espace, mais le tirage est accepté après vérification de l'existence d'au minimum deux intersections entre le contour des particules et les arêtes des hexagones afin de mettre les particules aux joints grains (figure IV.1.b).



(a) (b)

figure IV.1 : Microstructure avec les grains hexagonaux :
(a) les carbures dans la microstructure, (b) les carbures aux joints grains

I.1.1.4 Grains polygonaux

Une méthode de partition aléatoire est également choisie pour générer les grains : la partition de Voronoï. Des points aléatoires sont créés sur un plan afin de représenter les centres des cellules de Voronoï. En utilisant le logiciel *Qhull*® (Barber et al., 1996) les sommets des cellules sont calculés. Les diagrammes de Voronoï sont obtenus en utilisant la triangulation de Delaunay : à partir d'un ensemble de points dans un plan, la triangulation de Delaunay partitionne le plan de sorte qu'aucun point ne soit à l'intérieur du cercle circonscrit à chaque triangle. La triangulation de Delaunay maximise l'angle minimal de tous les angles des triangles. Le diagramme de Voronoï est le graphe dual de la triangulation de Delaunay : les médiatrices des arêtes de la triangulation de Delaunay créent les arêtes du diagramme de Voronoï (figure IV.2).

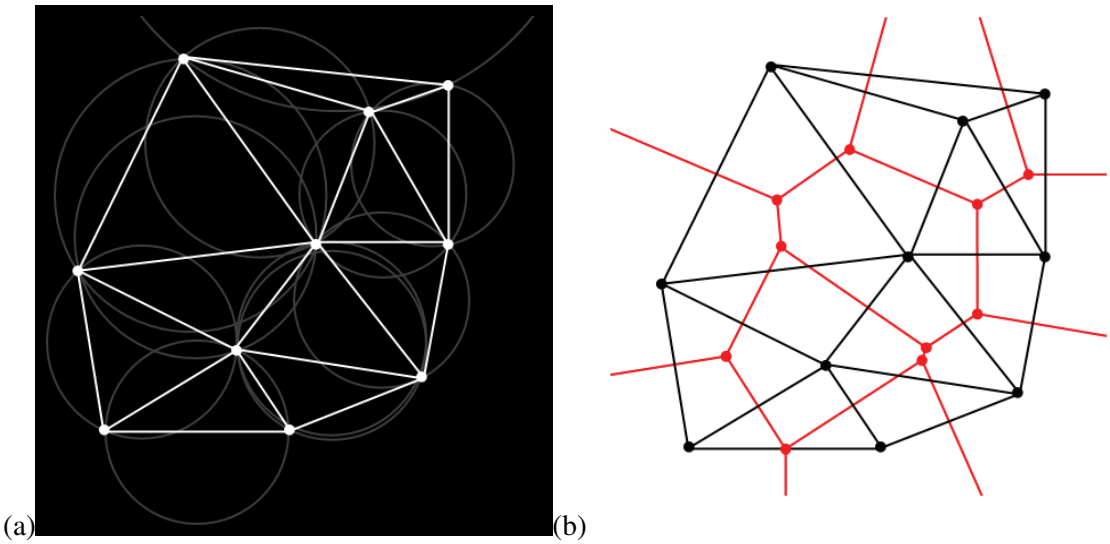


figure IV.2 : (a) Triangulation de Delaunay avec les cercles circonscrits visibles (b) Diagrammes de Voronoï par rapport à la triangulation de Delaunay (De Berg et al., 2008)

Les tailles des polygones peuvent être contrôlées en imposant une distance minimale entre les centres des polyèdres, c'est-à-dire entre les points qui servent à la triangulation de Delaunay. L'objectif est d'obtenir le même nombre de « grains » dans la microstructure avec les grains polygonaux que dans la microstructure avec les grains hexagonaux. Ainsi, la taille relative des grains et des particules est sensiblement identique dans les deux types de microstructures. Pour cette microstructure, les carbures sont répartis uniformément sur l'espace.

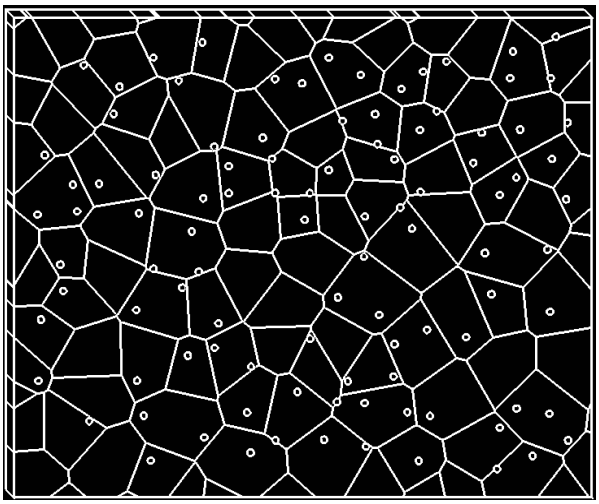


figure IV.3 : Microstructure avec les grains polygonaux

IV.2.2 Génération des orientations cristallines

Chaque grain dans la microstructure possède une orientation cristalline particulière. Les orientations cristallines sont définies à l'aide des angles Euler. Ils permettent de passer des coordonnées globales aux coordonnées cristallines par trois rotations. Il y a plusieurs définitions des angles Euler. La présentation de Bunges est utilisée ici pour définir les rotations cristallines. En utilisant trois directions fictives utilisant le vocable des structures laminées : ND (direction

normale), TD (direction transverse) et RD (direction de laminage) qui représentent le repère global sur l'échantillon, les trois rotations $\varphi_1, \phi, \varphi_2$ sont définies comme (figure IV.4) :

1. φ_1 est la rotation autour de la direction normale ND, qui transforme la direction transverse TD en TD´ et la direction de laminage RD en RD´.
2. ϕ est la rotation autour de l'axe RD´.
3. φ_2 est la rotation autour de l'axe ND´´.

Les angles Euler sont définis dans les limites de : $0^\circ \leq \phi_1, \phi_2 \leq 360^\circ$ et $0^\circ \leq \phi \leq 180^\circ$.

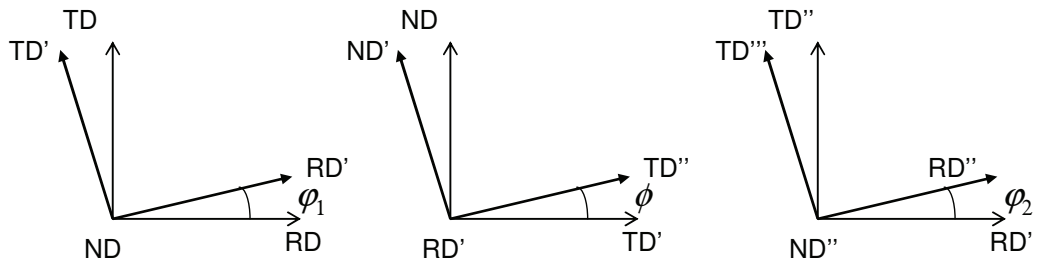


figure IV.4 : Représentation par les angles d'Euler des rotations entre le repère de l'échantillon (RD, TD, ND) et le repère du cristal (RD'', TD''', ND'')

Une distribution des orientations des grains complète la simulation de la microstructure. La distribution des orientations est définie en utilisant la méthode de tirage de nombres pseudo-aléatoire déjà présentée. Pour respecter une répartition uniforme des orientations dans l'espace, on tire aléatoirement les angles φ_1 et φ_2 sur l'intervalle $[0^\circ, 360^\circ]$, et on tire aléatoirement le cosinus de l'angle ϕ tel que $-1 \leq \cos\phi \leq 1$.

Les résultats du tirage aléatoire des angles d'Euler sont importés dans logiciel *OIM®* afin de pouvoir visualiser des orientations et étudier l'isotropie de la distribution. Les figures de pôles {001} et {011} (figure IV.5) montrent une distribution faiblement anisotrope des orientations des grains.

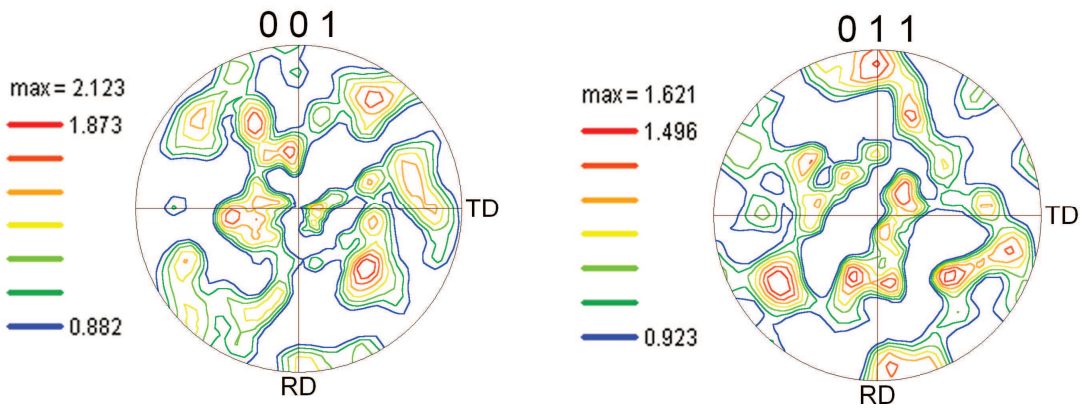
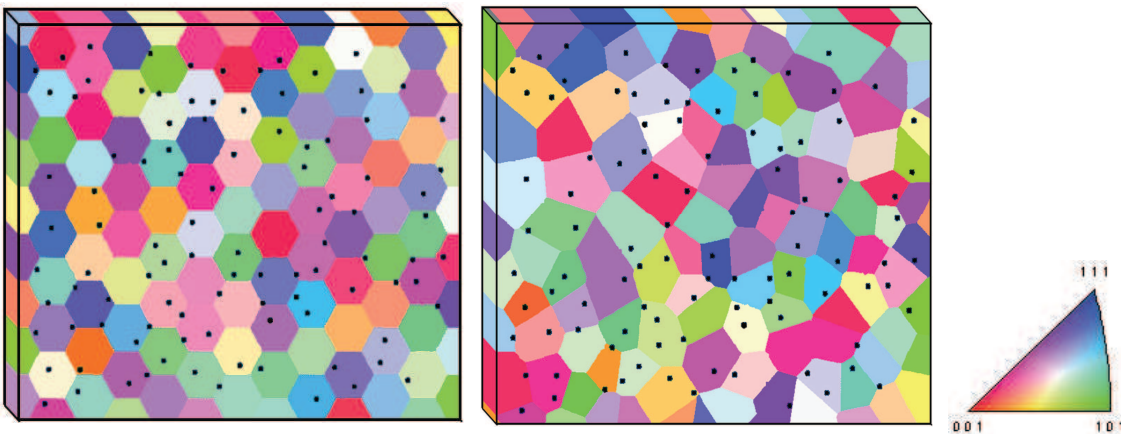


figure IV.5 : Figures de pôle {001} et {011} d'une distribution aléatoire des orientations cristallines (117 grains)

Les angles d'Euler associés aux éléments finis (présentés ensuite) sont utilisés pour construire la microstructure dans le logiciel *OIM*. Un programme *FORTRAN* récupère les angles d'Euler et la

position du centre des éléments. Une grille nous permet de récupérer les positions des points avec ses angles d'Euler associés. Ainsi, un fichier *OIM* peut être créé avec les positions des points et leurs angles d'Euler. Les figures de pôles inverses avec les hexagones et les polygones de Voronoï sont construites à l'aide du logiciel OIM (figure IV.6).



(a) (b)

figure IV.6 : Figures de pôles inverses pour les grains (a) hexagonaux (b) polygonaux
Chaque couleur correspond à une orientation cristalline. Les cercles noirs représentent les particules.

IV.3 ETUDE PARAMETRIQUE

IV.3.1 Introduction

On s'intéresse ici à l'influence de différents paramètres de modélisation sur la distribution des contraintes dans les carbures. Pour ce faire, on réalise des calculs par éléments finis sur les microstructures présentées au paragraphe précédent. Les conditions aux limites, maillage et comportement des matériaux sont présentés.

IV.3.2 Maillage et conditions aux limites

La microstructure est générée en 2D, mais une extension dans la troisième direction nous permet de considérer le glissement plastique sur tous les systèmes. Les éléments 3D de type C3D8R (éléments linéaires à 8-noeuds, avec intégration réduite) sont utilisés. Trois couches identiques sont superposées ; les grains sont des prismes à base hexagonale ou polygonale (cas des cellules de Voronoï). Chaque disque est maillé avec 100 éléments (taille moyenne de 15% du rayon du disque), tandis que la taille moyenne des éléments dans chaque grain est fixée à 15% du rayon du cercle circonscrit à l'hexagone. Un maillage plus fin est effectué au voisinage des disques dans les grains (figure IV.7.b.). Le nombre d'éléments utilisés pour la microstructure est d'environ 280000.

Deux types de conditions aux limites sont étudiés : 1) Les conditions de déformations planes sont imposées sur l'agrégat en bloquant les 2 faces dans la direction 3 (figure IV.7) afin de s'approcher d'un état mécanique dans le plan central d'une éprouvette épaisse comportant une fissure ; 2) les conditions de contraintes planes sont imposées « globalement » : les conditions

aux limites dans la direction 3 sont telles que la déformation axiale associée est libre et homogène au contour (la face reste plane).

Dans les deux cas, les conditions de faces planes sont utilisées : une des 2 faces perpendiculaires à la direction 1 est bloquée dans cette direction et un déplacement homogène dans cette direction de valeur inconnue est imposé sur la face opposée. La face du bas est bloquée dans la direction 2 et sur la face supérieure un déplacement de 10% de la hauteur de l'agrégat est imposé dans cette direction. La vitesse de déformation de traction est fixée à 10^{-4} /s.

On s'intéresse au chargement des carbures afin de déterminer ultérieurement la probabilité de créer des microfissures et donc la distribution des microfissures de clivage. Afin de sélectionner les carbures qui donneront lieu à une microfissure perpendiculaire à la direction d'ouverture, on s'intéresse à la contrainte de traction σ_{22} dans les carbures. En effet, les hétérogénéités locales peuvent conduire à des contraintes principales maximales associées à la direction 3. Par ailleurs, de fortes variations de contraintes avec des oscillations peuvent apparaître dans les carbures. Afin de s'affranchir de valeurs extrêmes très locales, nous faisons la moyenne des contraintes de traction dans chaque carbure σ^c_{22}. Le chargement macroscopique sera déterminé par des moyennes effectuées sur la couche centrale afin d'éviter les effets de bords : $\Sigma_{22} = \langle\sigma_{22}\rangle_{couche}$.

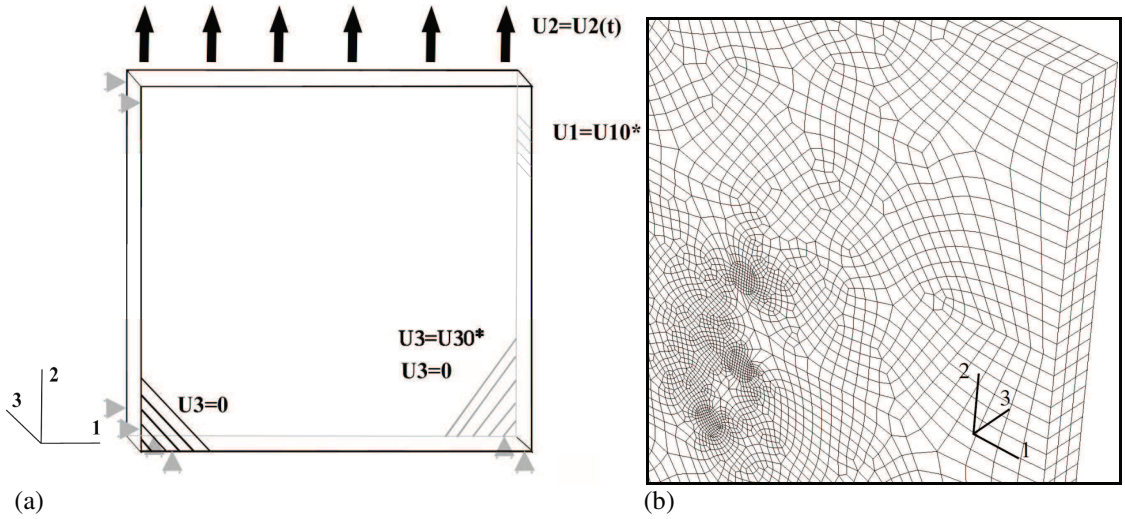


figure IV.7 : Conditions aux limites sur l'agrégat , U10* est le déplacement dans la direction 1 constant sur la face de droite, U30* est le déplacement constant dans la direction 3 appliqué sur la face arrière

IV.3.3 Comportements mécaniques

La microstructure est constituée par les grains de ferrite et les particules. Le comportement des particules est considéré élastique linéaire isotrope et les grains de ferrite ont un comportement monocristallin.

Les carbures sont constitués essentiellement de cémentite, Fe_3C. Li et al. (1998) trouvent 160GPa et 0.26 pour le module de Young et le coefficient de Poisson, alors que Mizubayashi et al. (1999) trouvent un module de Young de 177GPa. Che et al. (2007) ont trouvé sur des particules de cémentite sphériques, les valeurs entre 262 et 282GPa pour le module de Young et entre 0,22 et 0,26 pour le coefficient de Poisson. Etant données les divergences rencontrées dans

la littérature, nous avons choisi les valeurs intermédiaires de 210GPa et 0,3 pour le module de Young et le coefficient de Poisson.

Une loi de comportement cristalline est utilisée pour les grains de ferrite afin de prendre en compte les orientations cristallines. Le modèle utilisé est celui développé dans Abaqus, CristalECP. Il a été décrit au chapitre II. Ce modèle comporte 12 coefficients pour décrire le comportement du matériau. Les valeurs des paramètres du modèle cristallin sont présentées dans le tableau IV-1. On en déduit que la valeur de la cission critique initiale ($\tau^s_{c_0}$) vaut 26 MPa, et que la limite d'élasticité macroscopique est d'environ 85MPa. Cette valeur est faible et correspond à un comportement à température ambiante pour un acier doux. Les paramètres spécifiques au matériau étudié seront identifiés dans une seconde étape.

E (GPa)	ν	n	$\dot{\gamma}_0$ (s^{-1})	τ_0 (MPa)	b (nm)
210	0,29	100	10^{-11}	20	0,25
ρ_0 (m^{-2})	a^{ss}	a^{su}	g_c (nm)	K	D (mm)
15×10^9	0,25	0,25	8	41	0,075

tableau IV-1 : Paramètres du comportement cristallin d'un acier IF (Erieau et Rey, 2004)

IV.4 RESULTATS DE L'ETUDE PARAMETRIQUE

IV.4.1 Hétérogénéité due à l'échelle cristalline

Un tirage aléatoire des orientations cristallines des grains hexagonaux est choisi pour réaliser un calcul de microstructure. Les résultats du calcul en déformations planes montre une forte hétérogénéité des champs mécaniques (figure IV.8). En imposant 10% de déformation globale en traction sur l'agrégat, on atteint localement 42% de déformation axiale dans la microstructure. Les déformations sont localisées aux joints des grains, et parfois aux interfaces particule/grain. Les bandes de localisation des déformations sont orientées à 45º par rapport à l'axe de traction, résultat classique dans les calculs polycristallins (figure IV.8.a). La présence des particules élastiques ne perturbe pas ce résultat.

Les concentrations des contraintes de traction (σ_{22}) sont parallèles à l'axe de traction et sont localisées aux joints des grains ou aux interfaces particule/grain (figure IV.8.b). Les plus fortes concentrations des contraintes sont aux joints de grains, mais des chemins de charge traversent les grains qui ne sont pas forcément les grains les plus déformés. Ce sont les désorientations cristallines locales qui pilotent ces hétérogénéités plutôt que la présence des particules élastiques.

Le niveau des contraintes σ_{22} dans les carbures est plus élevé que celui dans les grains. Après 10% de déformation, la valeur maximale de contrainte de traction dans la matrice est environ deux fois plus grande que la contrainte macroscopique Σ_{22} ($\Sigma_{22} = \langle\sigma_{22}\rangle_{couche}$). La contrainte de traction dans les carbures peut être jusqu'à trois fois plus élevée que la contrainte macroscopique après 10% de déformation macroscopique.

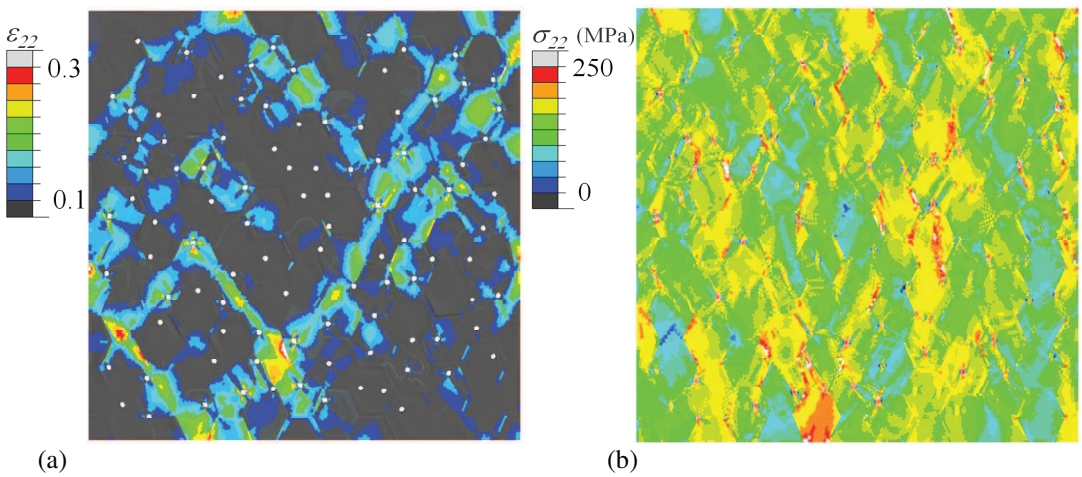


figure IV.8 : (a) Champ de déformation axiale dans la matrice, ε_{22} (b) Champ de contrainte de traction σ_{22} d'un calcul en déformations planes, après 10% de déformation

Afin de déterminer l'influence de la plasticité cristalline sur les hétérogénéités mécaniques, on réalise deux calculs cristallins en contraintes planes avec la même microstructure cristalline : le premier sans carbure, qui nous permet d'avoir le comportement du matériau homogène équivalent (MHE) à la matrice ferritique, le second qui nous permet d'obtenir les hétérogénéités mécaniques.

La courbe globale contrainte-déformation du calcul sans carbure montre un écrouissage moins important que celui du calcul avec carbures (figure IV.9). Cela est lié à la présence des carbures, phase qui reste élastique. La courbe contrainte-déformation issue du comportement global du calcul cristallin sans carbure est utilisée pour déterminer une loi de comportement élasto-plastique à écrouissage isotrope pour la matrice autour des carbures dans le calcul homogène.

La courbe globale contrainte-déformation du calcul avec MHE en contraintes planes est obtenue et comparée avec le résultat du calcul cristallin en contraintes planes. On vérifie que les deux courbes sont quasiment identiques. Malgré un faible durcissement supplémentaire lorsque la matrice est polycristalline, on peut considérer le volume comme représentatif d'un matériau de comportement isotrope.

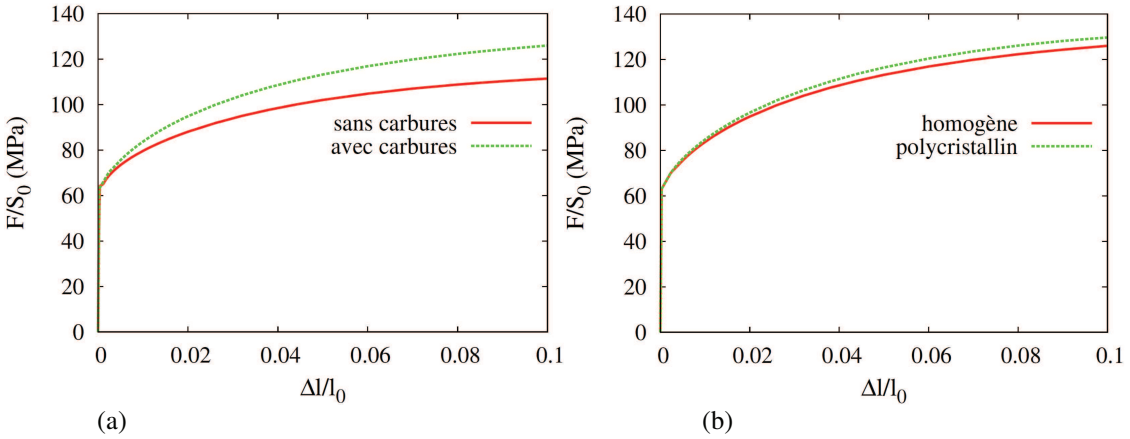


figure IV.9 : Courbes globales sur l'agrégrat (a) calcul cristallin sans et avec carbures (b) calcul cristallin et homogène avec carbures

Les hétérogénéités mécaniques dans le calcul avec MHE sont nettement inférieures à celles du calcul cristallin ; de faibles localisations des contraintes et des déformations se forment aux interfaces carbure/grain (figure IV.10). Le niveau de déformation maximale atteint localement 20% aux interfaces particule/grain, alors que dans le calcul cristallin, le niveau de déformation peut atteint localement 32% (figure IV.11).

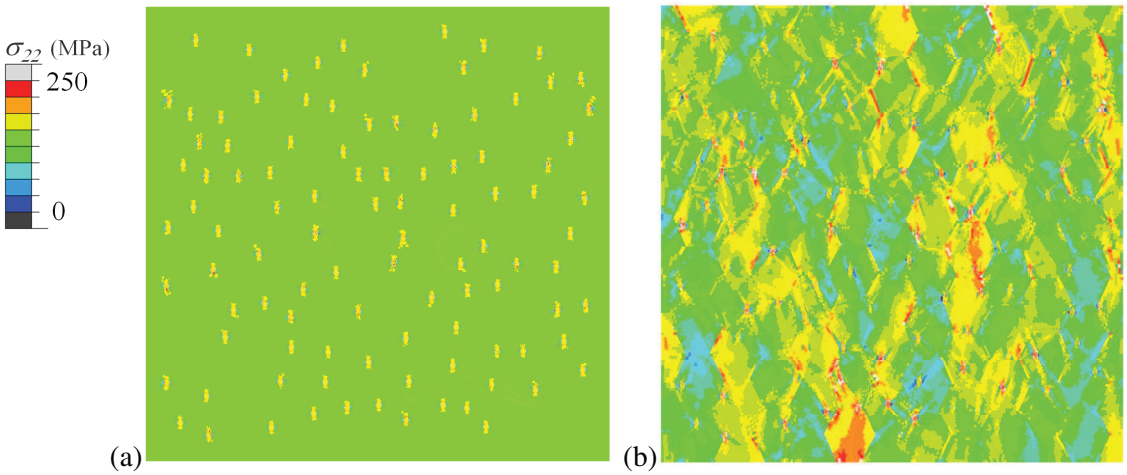


figure IV.10 : Champs de contrainte axiale en contraintes planes, σ_{22} en MPa (a) d'une simulation avec matériau homogène équivalent (b) une simulation cristalline, après 10% de déformation

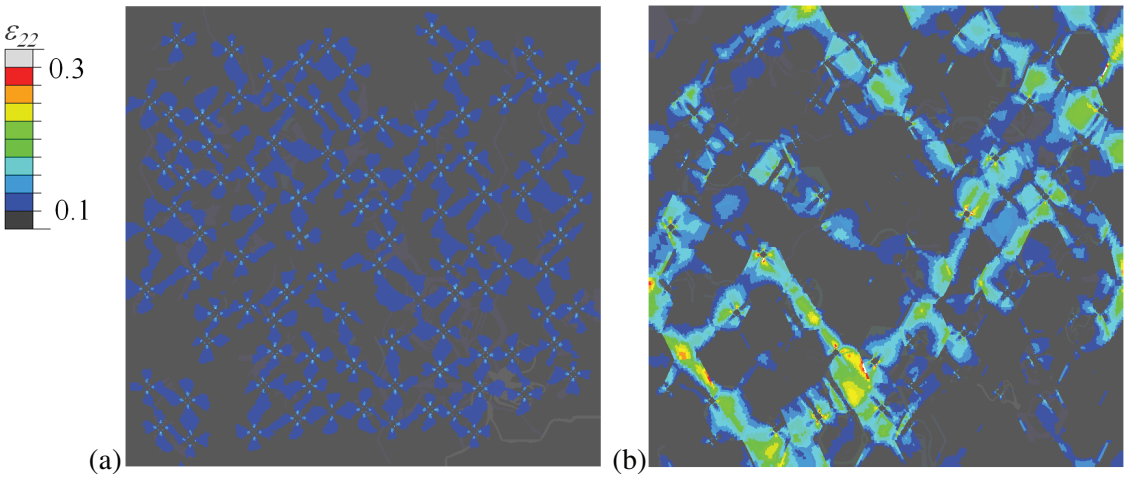


figure IV.11 : Champs de déformation axiale en contraintes planes, ε_{22} (a) simulation avec matériau homogène équivalent (b) simulation cristalline, après 10% de déformation

Les champs de contrainte de traction et de déformation axiale dans une microstructure sans carbure sont présentés sur la figure IV.12. Il faut rappeler que la distribution des orientations cristallines des grains n'est pas la même que celle de la microstructure précédente (avec les carbures) ; par conséquent les localisations des contraintes et des déformations ne se forment pas sur les mêmes endroits. Néanmoins, les bandes de localisation de déformation sont toujours à 45° par rapport à l'axe de traction, tandis que les bandes de localisation des contraintes de traction sont orientées dans la direction de traction. Cela est en accord avec les résultats de

microstructure en présence des carbures : la présence des carbures a peu d'influence sur la localisation des contrainte et déformation axiales.

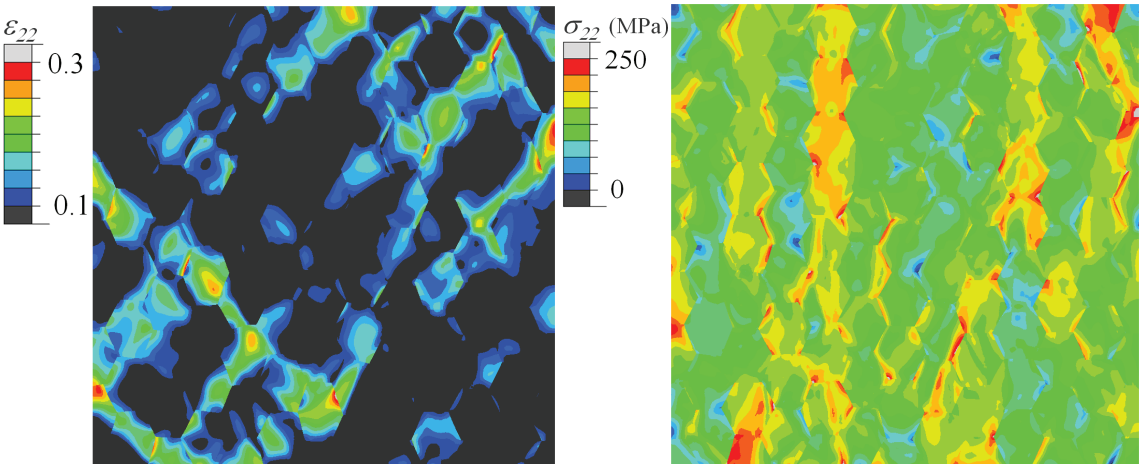


figure IV.12 : Champs de déformation axiale, ε_{22} (a) contrainte de traction σ_{22} (b) simulation cristalline, sans carbure, en contraintes planes après 10% de déformation

Le chargement dans les carbures est étudié quantitativement avec les histogrammes de distribution de contrainte de traction dans les carbures. La contrainte de traction dans les carbures est normalisée par la contrainte de traction macroscopique ($\sigma_{22}^{c} / \Sigma_{22}$). Les histogrammes sont tracés pour 10% de déformation globale et sont présentés sur la figure IV.13 pour les calculs homogène et cristallin. L'histogramme issu du calcul cristallin est plus large et montre une hétérogénéité plus importante que celui issu du calcul homogène. Le mode des valeurs de $\sigma_{22}^{c} / \Sigma_{22}$ est plus faible pour le calcul homogène avec MHE.

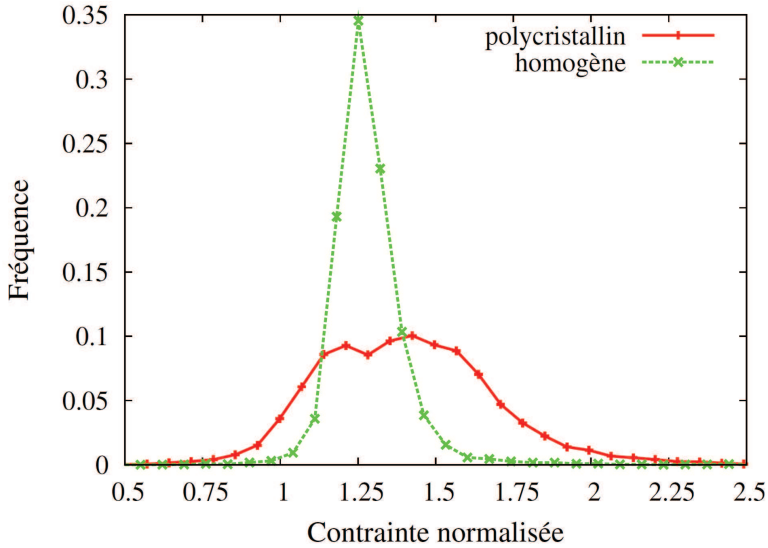


figure IV.13 : Distribution des contraintes dans les carbures à 10% de déformation macroscopique pour un calcul cristallin et un calcul avec MHE (calculs en contraintes planes)

Les histogrammes d'un calcul cristallin en contraintes planes sont tracés pour différents niveaux de déformation globale (2%, 5%, 8% et 10%) (figure IV.14) afin d'étudier l'influence du niveau

de déformation sur la dispersion des contraintes dans les carbures. Les distributions montrent qu'en augmentant la déformation macroscopique, l'hétérogénéité des contraintes augmente dans les carbures. La distribution des contraintes est plus symétrique à 2% de déformation mais elle devient asymétrique (il y a davantage de carbures sollicités au-delà de la valeur modale de la contrainte, que de carbures sollicités en deçà de cette valeur), et pour les déformations de 8% et 10% la distribution a tendance à devenir bimodale

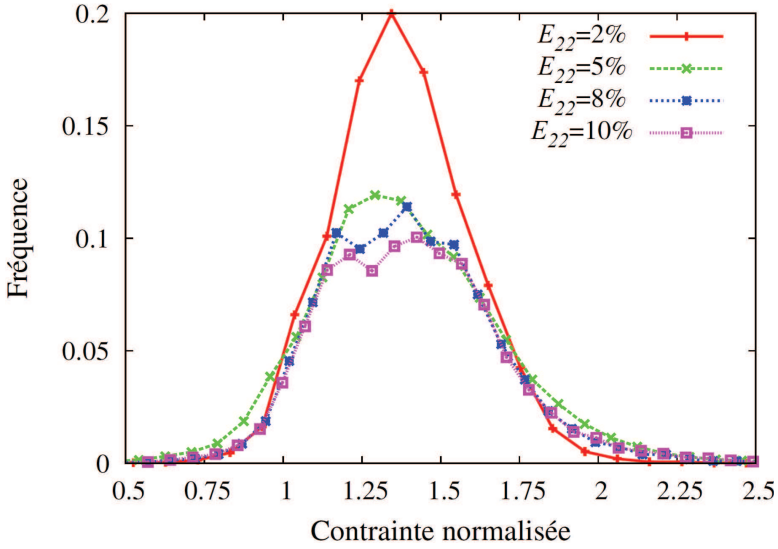


figure IV.14 : Distribution des contraintes dans les carbures pour un calcul cristallin à différents niveaux de déformation globale (calculs en contraintes planes)

Le coefficient de variation (C_v, rapport de l'écart-type sur la valeur moyenne) de σ_{22}^c est tracé en fonction de la déformation macroscopique pour les calculs cristallin et homogène équivalent (figure IV.15(a)). Le coefficient de variation est deux fois plus grand dans le calcul cristallin que celui obtenu en considérant la matrice homogène.

La contrainte moyennée sur tous les carbures ($<\sigma_{22}^c>$) divisée par la contrainte macroscopique est tracée en fonction de la déformation macroscopique sur la figure IV.15(b) pour les calculs cristallin et homogène. Le rapport de la contrainte dans les carbures sur la contrainte macroscopique est plus important pour le calcul cristallin et augmente avec la déformation macroscopique. Dans le calcul homogène, la contrainte moyenne de traction dans les carbures est toujours plus grande que la contrainte macroscopique, mais ce rapport diminue lorsque la déformation macroscopique augmente : dans le calcul homogène, le niveau des contraintes de la couche augmente plus rapidement que celui des carbures au cours de la déformation, donc le rapport entre les deux valeurs décroît. Les résultats concernant le coefficient de variation et la contrainte moyenne dans les carbures indiquent que les particules élastiques fragiles dans un environnement cristallin sont plus critiques que lorsqu'elles se trouvent dans le milieu homogène équivalent. L'écart entre ces deux modélisations se creuse lorsque la déformation macroscopique augmente.

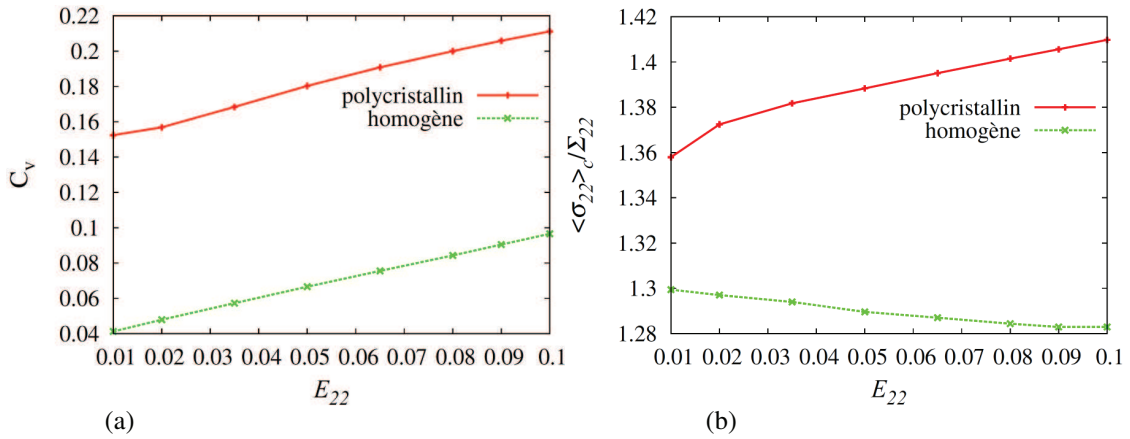


figure IV.15 : (a) Coefficient de variation (b) contrainte moyenne des carbures divisée par la contrainte macroscopique en fonction de la déformation macroscopique

La contrainte moyennée sur tous les carbures ($<\sigma_{22}^c>$) divisée par la contrainte macroscopique et le coefficient de variation sont tracés en fonction de la déformation macroscopique. Ces grandeurs sont comparées pour les conditions de contraintes planes et déformations planes sur la figure IV.16. Les deux grandeurs ($<\sigma_{22}^c>_c/\ \Sigma_{22}$) et ($C_v$) sont des fonctions croissantes de la déformation. La dispersion des contraintes est plus élevée dans la condition de déformations planes, tandis que la valeur de $<\sigma_{22}^c>_c/\ \Sigma_{22}$ est plus faible pour cette condition ; cela peut être lié au chargement de la matrice plus important dans ce cas.

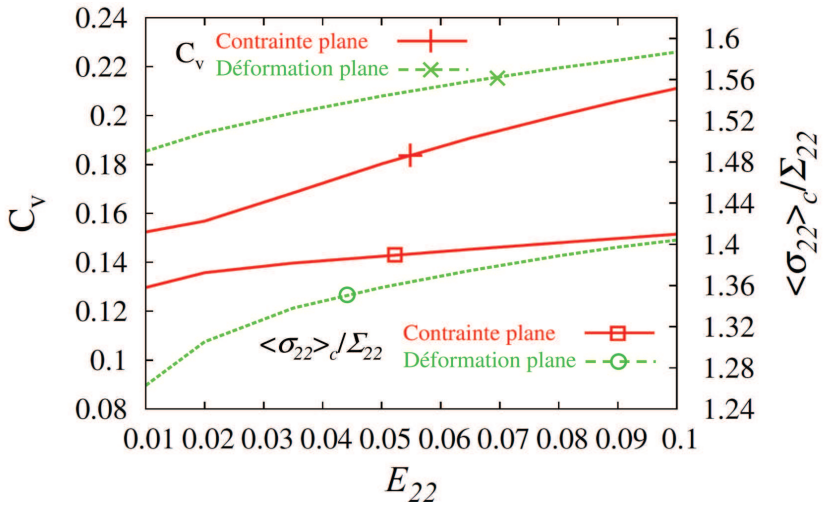


figure IV.16 : Coefficient de variation et contrainte moyenne dans les carbures divisée par la contrainte macroscopique, en fonction de la déformation macroscopique pour les calculs en contraintes planes et déformations planes

La distribution des contraintes dans les carbures est tracée pour un calcul en déformations planes à différents niveaux de déformation macroscopique (2%, 5%, 8% et 10%) (figure IV.17). Les résultats montrent que, comme dans le calcul en contraintes planes, l'hétérogénéité des contraintes dans les carbures augmente en fonction de la déformation globale. La distribution est asymétrique surtout aux faibles déformations, mais l'asymétrie est opposée à celle observée en contraintes planes : la valeur modale est plus faible que la moyenne. Cette différence diminue lorsque la déformation macroscopique augmente. En conclusion, la condition de déformations

planes augmente la sensibilité du chargement des carbures à la déformation, ainsi que la dispersion de ce chargement.

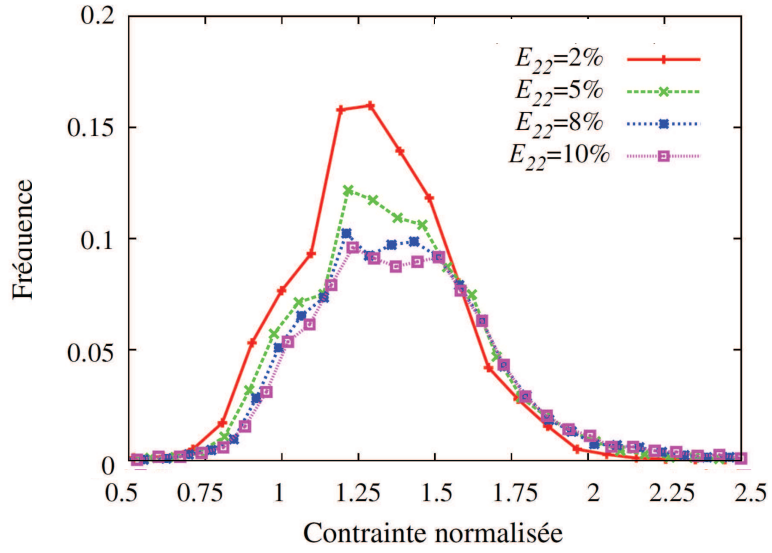


figure IV.17 : Distribution des contraintes dans les carbures d'un calcul en déformations planes

IV.4.2 Influence de la distribution d'orientation cristalline des grains

Trois distributions d'orientations cristallines des grains sont générées aléatoirement et sont utilisées pour réaliser trois calculs polycristallins afin d'étudier l'influence de la distribution des orientations des grains sur le comportement global de l'agrégat et sur la distribution des contraintes. La répartition spatiale des carbures est identique dans les trois cas. Les distributions d'orientations des grains sont quasi-isotropes dans les trois cas (figure IV.18).

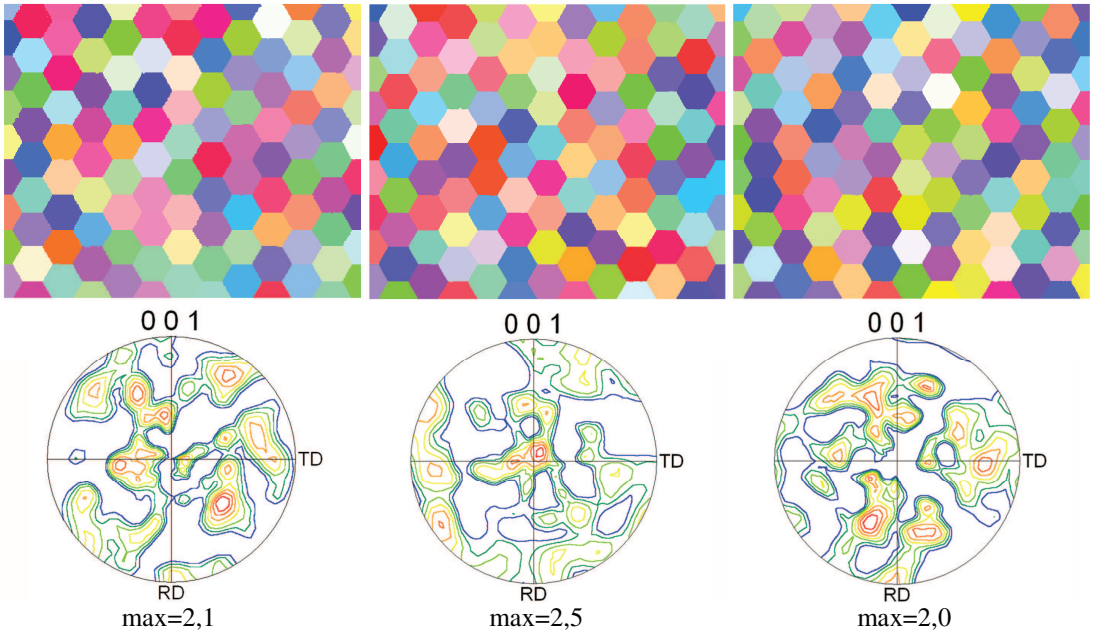


figure IV.18 : Figures de pôles inverses et figures de pôles {001} pour trois distributions d'orientations cristallines des grains

Les courbes globales en contrainte-déformation sont quasiment identiques pour les trois distributions quelle que soit la condition de contraintes planes ou de déformations planes (figure IV.19). Les résultats présentés par la suite sont obtenus en déformations planes.

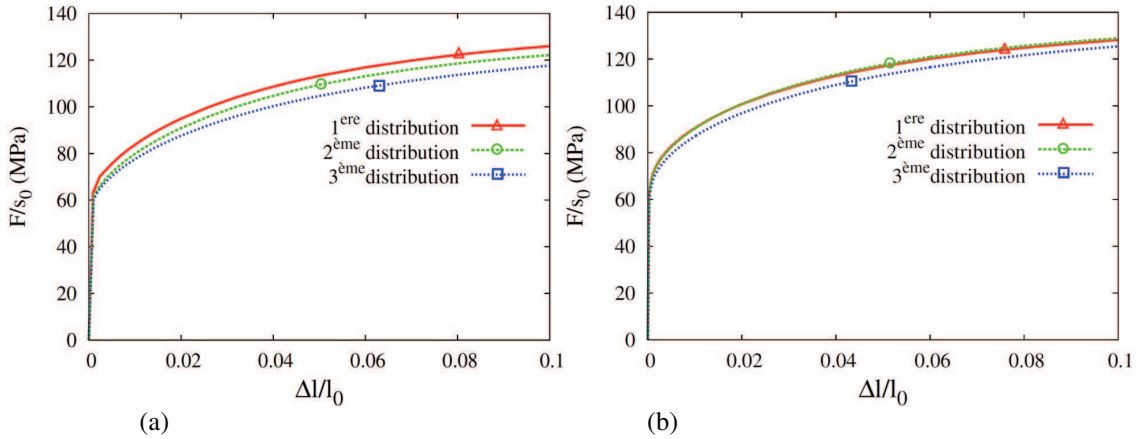


figure IV.19 : Courbes globales en contrainte-déformation pour trois distributions d'orientations des grains, (a) en contraintes planes (b) en déformations planes

Les histogrammes des contraintes dans les carbures des trois distributions d'orientations ne sont pas très différents (figure IV.20.a). Le coefficient de variation des contraintes dans les carbures montre 8% de différence entre les trois calculs et la contrainte moyenne des carbures varie peu d'un cas à l'autre (figure IV.20.b). Elle est néanmoins plus faible pour la deuxième simulation.

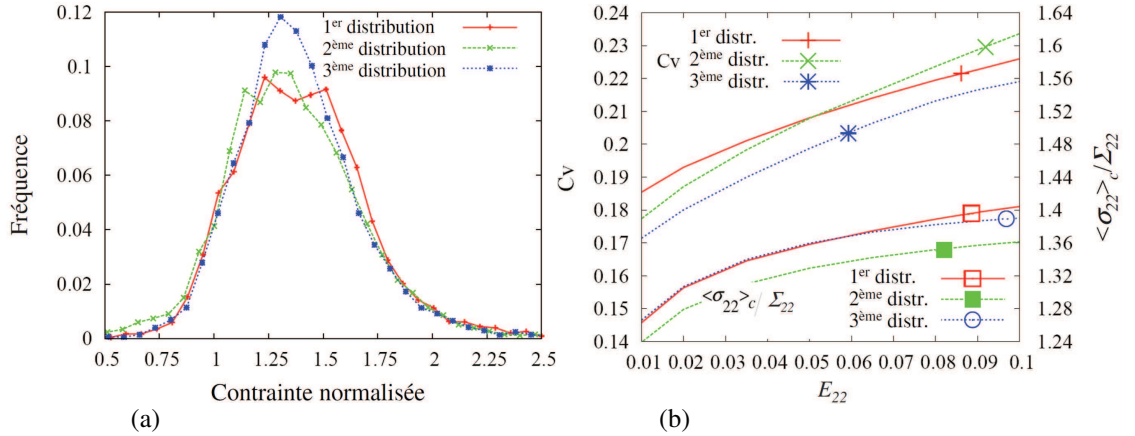


figure IV.20 : (a) Distribution des contraintes dans les carbures (b) Coefficient de variation et contrainte moyenne des carbures divisée par la contrainte macroscopique en fonction de la déformation macroscopique, pour trois distributions d'orientations cristallines des grains (en déformations planes)

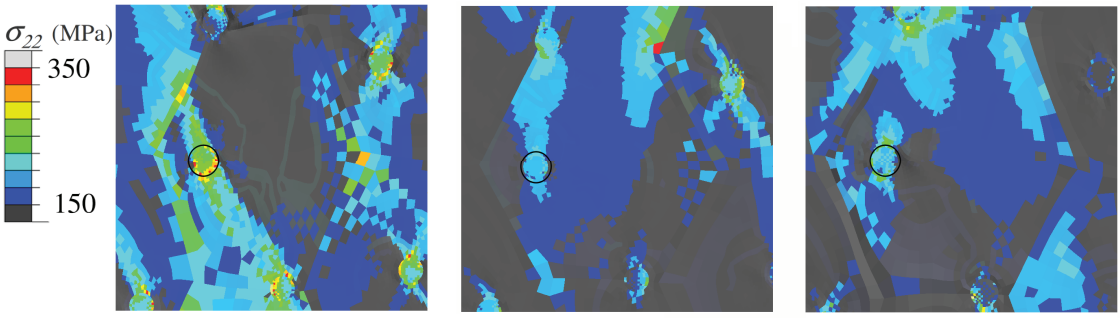
On s'intéresse à la sollicitation d'un carbure en particulier afin de déterminer la zone d'influence des grains voisins sur le chargement qu'il subit. Dans le premier cas (première distribution d'orientations cristallines), un carbure subissant un niveau de contrainte élevé est choisi. Ce carbure est situé dans le grain le plus déformé de la première distribution. La contrainte de traction dans le carbure sélectionné, la déformation dans la direction de traction et la densité de dislocations moyennées dans le grain contenant le carbure sélectionné sont relevées (tableau IV-2). La contrainte dans le carbure sélectionné varie de 30% entre le calcul avec la première

distribution et celui avec la deuxième distribution des orientations cristallines. La déformation moyenne dans le grain varie d'environ 78% alors que la densité de dislocations varie de 48%.

La figure IV.21 montre les champs de contrainte de traction autour du carbure sélectionné pour les trois distributions d'orientations cristallines. Le niveau de contrainte est plus élevé dans le cas de la première distribution. Les champs de déformation et la densité de dislocation sont présentés sur la figure IV.22 pour la deuxième et la troisième distribution.

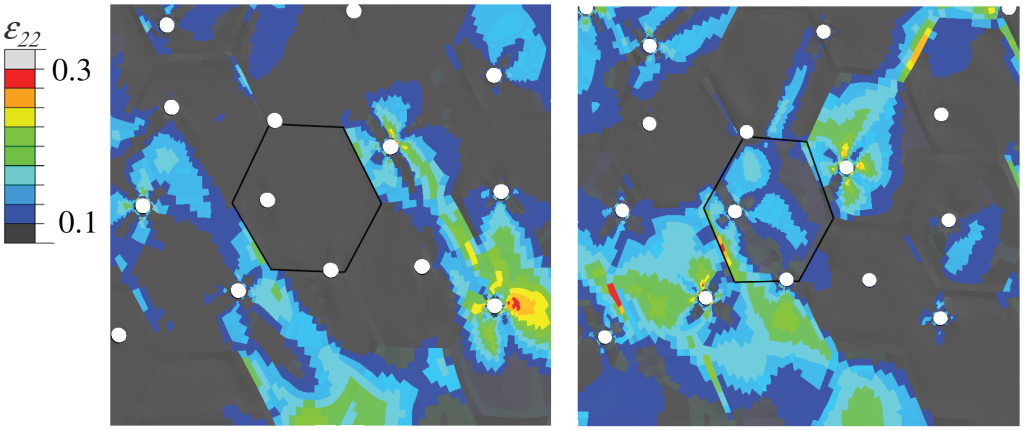
	σ^c_{22}	$<\varepsilon_{22}>$	$<\rho>$
	MPa	-	mm^{-2}
1ère distribution	267	0,19	65×10^6
2ème distribution	189	0,04	33×10^6
3ème distribution	199	0,12	50×10^6

tableau IV-2 : Contrainte de traction dans le carbure sélectionné, déformation dans la direction de traction et densité de dislocations dans le grain contenant le carbure sélectionné, pour trois distributions des orientations cristallines des grains



1ère distribution 2ème distribution 3ème distribution

figure IV.21 : Champ de contrainte de traction σ_{22}, autour d'un carbure donné pour trois distributions des orientations cristallines des grains



(a) (b)

figure IV.22 : Champ de la déformation (a) deuxième (b) troisième distribution d'orientations cristallines

Afin d'étudier l'influence de l'orientation d'un grain contenant un carbure et celle de l'orientation de ses grains voisins sur le chargement de ce carbure, on réalise trois études. Pour

les trois études, le grain contenant le carbure le plus chargé dans la première distribution est sélectionné.

La première étude consiste à faire varier l'orientation cristalline du grain qui contient le carbure sélectionné, afin de noter les variations des champs mécaniques dans le grain ainsi que dans le carbure contenu dans ce grain. Trois tirages aléatoires sont réalisés pour déterminer les angles d'Euler définissant l'orientation cristalline du grain. Les valeurs moyennes de la déformation ($<\varepsilon_{22}>_{grain}$), la densité de dislocations ($<\rho>_{grain}$) et la contrainte moyenne du carbure $<\sigma_{22}^{c}>$ sont présentées pour le grain sélectionné avec quatre orientations différentes dans le tableau IV-3. Les résultats des calculs montrent une variation de 40% maximum (écart relatif entre la valeur minimale et la valeur maximale), pour une variation de déformation de 50%, mais la valeur minimale de contrainte n'est pas liée à la valeur minimale de déformation. Néanmoins, on note que plus la déformation est élevée, plus la contrainte est élevée. C'est un résultat attendu, dans le cas d'une particule dure entouré d'un milieu homogène, car la particule est chargée par l'intermédiaire de la déformation plastique de la matrice.

	σ_{22}^{c}	$<\varepsilon_{22}>_{grain}$	$<\rho>_{grain}$
	MPa	-	mm^{-2}
1ère distribution	267	0,19	65×10^{6}
2ème orientation	283	0,18	10×10^{7}
3ème orientation	240	0,08	10×10^{7}
4ème orientation	202	0,14	71×10^{6}

tableau IV-3 : Contrainte moyenne de traction dans le carbure sélectionné, déformation dans la direction de traction et densité de dislocations moyennes dans le grain contenant le carbure sélectionné, pour quatre orientations cristallines du grain contenant le carbure sélectionné

La deuxième étude consiste à faire varier les orientations cristallines des six grains situés autour du grain sélectionné en même temps que l'orientation du grain initialement sélectionné (figure IV.23). Quatre calculs sont réalisés. La désorientation entre le grain sélectionné et les 6 grains voisins est calculée pour les quatre simulations avec le logiciel *OIM*. Elle est définie en utilisant l'axe de rotation commun aux 2 cristaux. La valeur de cette désorientation est la rotation autour de cet axe pour mettre les deux réseaux en coïncidence. Les désorientations pour les quatre cas sont présentées en degré dans le tableau IV-4.

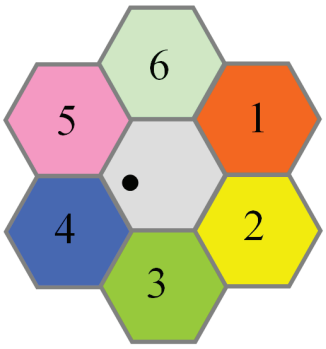
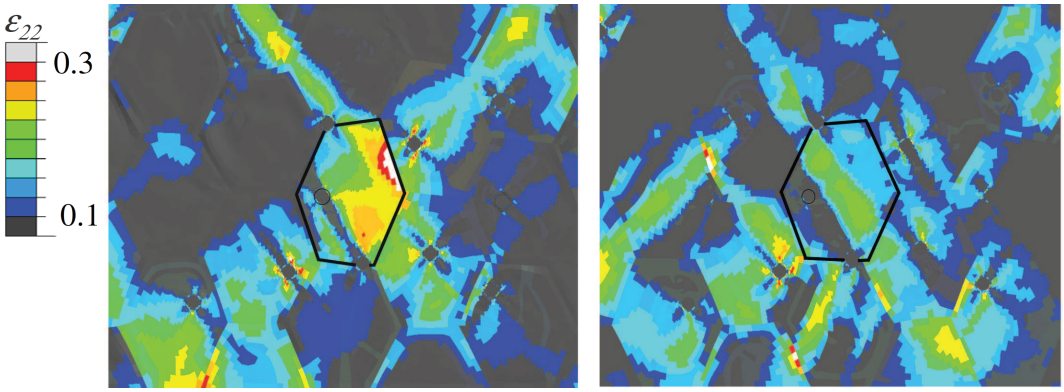


figure IV.23 : Grain sélectionné par rapport aux grains voisins

	désorientation initiale	2ème orientation	3ème orientation	4ème orientation
Grain n° 1	38	48	18	36
Grain n° 2	39	48	28	53
Grain n° 3	45	31	30	43
Grain n° 4	45	28	40	33
Grain n° 5	50	49	48	43
Grain n° 6	49	19	44	33

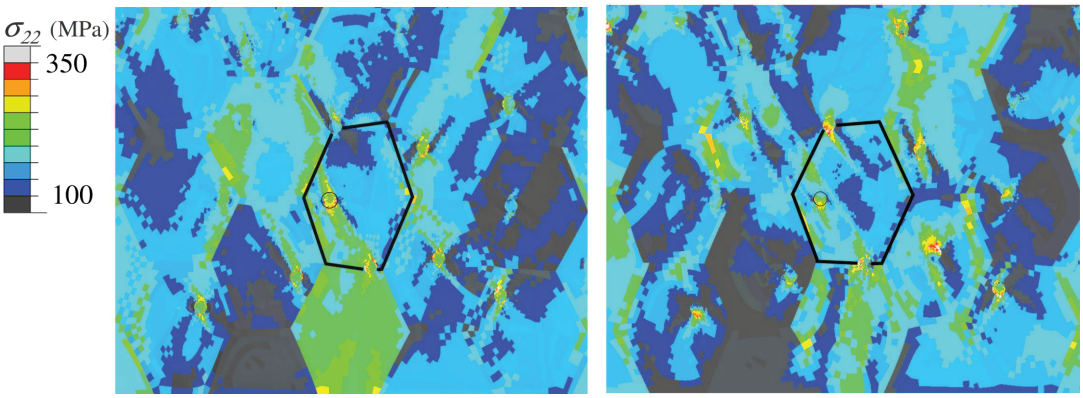
tableau IV-4 : Désorientation du grain sélectionné par rapport aux six grains voisins, pour quatre distributions d'orientations cristallines des grains voisins et du grain contenant le carbure sélectionné

Les champs mécaniques changent dans le grain et le carbure (figure IV.24 et figure IV.25). La déformation du grain montre une chute maximale de 37%. Le niveau de contrainte moyenne dans le carbure diminue jusqu'à 20%. On note que les carbures situés dans les grains voisins (pour lesquels l'orientation cristalline a changé) sont soumis à des contraintes différentes.



(a) (b)

figure IV.24 : Champ de la déformation (a) première (b) deuxième distribution d'orientation cristalline des grains voisins



(a) (b)

figure IV.25 : Champ de la contrainte de traction (a) première (b) deuxième distribution d'orientation cristalline des grains voisins

On étudie la contrainte moyenne dans le carbure sélectionné en fonction de la désorientation moyenne et maximale des six grains par rapport au grain contenant le carbure (tableau IV-5). La variation de la contrainte moyenne dans le carbure est de 45% entre le cas de l'orientation initiale et la troisième orientation. Dans le cas qui présente la désorientation moyenne la plus grande (orientation initiale), la contrainte dans le carbure est la plus élevée. Les contraintes les plus faibles sont trouvées dans le cas des désorientations moyennes les plus faibles, bien que les relations d'ordre ne soient pas exactement respectées. Par contre, la désorientation maximale n'est pas critique car elle ne varie quasiment pas entre les 4 distributions.

	Contrainte dans le carbure (MPa)	Désorientation moyenne	Désorientation maximale
Orientation initiale	267	44	50
2ème orientation	217	32	49
3ème orientation	181	35	48
4ème orientation	255	40	53

tableau IV-5 : Contrainte moyenne dans le carbure sélectionné, désorientation moyenne et désorientation maximale des grains voisins par rapport au grain sélectionné, pour quatre tirages des orientations cristallines des grains voisins et du grain contenant le carbure sélectionné

Les valeurs moyennes de la déformation dans les grains ($<\varepsilon_{22}>_{grain}$), de la densité de dislocations ($<\rho>_{grain}$) et du nombre des système activés ($<N>_{grain}$) sont calculées afin d'étudier l'évolution du chargement du carbure par rapport à ces grandeurs, après 10% de déformation macroscopique (tableau IV-6). Les valeurs extrêmes de la contrainte dans le carbure sont quasi-identiques pour des valeurs de déformation dans le grain (1ère orientation et 3ème orientation). Néanmoins, le nombre de systèmes de glissement activé est différent, de même que la densité totale de dislocations.

	Carbure	Grain sélectionné			Six grains voisins		
	σ_{22}^{c}	$<\varepsilon_{22}>_{grain}$	$<\rho>_{grain}$	$<N>_{grain}$	$<\varepsilon_{22}>$	$<\rho>$	$<N>$
	MPa	-	mm^{-2}	-	-	mm^{-2}	-
Orientation initiale	267	0,19	65×10^{6}	3,9	0,12	63×10^{6}	3,7
2ème orientation	217	0,14	82×10^{6}	3,9	0,12	55×10^{6}	3,5
3ème orientation	181	0,19	36×10^{6}	2,3	0,12	49×10^{6}	3,4
4ème orientation	255	0,18	77×10^{6}	3,7	0,12	58×10^{6}	3,4

tableau IV-6 : Contrainte moyenne de traction dans le carbure sélectionné, moyennes de la déformation dans la direction de traction dans le grain sélectionné et dans les 6 grains voisins, moyennes de la densité de dislocations pour quatre distributions des orientations cristallines des grains voisins et du grain contenant le carbure sélectionné après 10% de déformation

La troisième étude consiste à fixer l'orientation initiale du grain contenant le carbure le plus chargé et à modifier uniquement les orientations des grains voisins : les grains voisins ont les orientations utilisées dans l'étude précédente. Les désorientations des grains voisins par rapport au grain sélectionné, la désorientation moyenne et la désorientation maximale des grains voisins,

sont présentées dans le tableau IV-7 et le tableau IV-8. La contrainte moyenne dans le carbure montre une variation de 23% entre l'orientation initiale et la deuxième orientation. Malgré le fait que la contrainte moyenne dans le carbure est plus élevée dans le cas de désorientation moyenne la plus élevée (orientation initiale), il n'y a pas de relation entre la désorientation moyenne ou la désorientation maximale et la contrainte moyenne du carbure.

	Orientation initiale	2ème orientation	3ème orientation	4ème orientation
Grain n° 1	38	50	53	36
Grain n° 2	39	31	42	22
Grain n° 3	45	40	36	24
Grain n° 4	45	18	54	51
Grain n° 5	50	28	40	33
Grain n° 6	49	40	37	36

tableau IV-7 : Désorientation du grain sélectionné par rapport aux six grains voisins, pour quatre tirages des orientations cristallines des grains voisins

	Contrainte du carbure (MPa)	Désorientation moyenne	Désorientation maximum
Orientation initiale	267	44	49
2ème orientation	217	34	50
3ème orientation	214	44	5
4ème orientation	246	34	51

tableau IV-8 : Contrainte moyenne dans le carbure sélectionné, désorientation moyenne et désorientation maximale des grains voisins par rapport au grain selectionné, pour quatre tirages des orientations cristallines des grains voisins

L'évolution des valeurs moyennes de la déformation et la densité de dislocations par rapport à la contrainte moyenne du carbure sélectionné sont présentées dans le tableau IV-9. On retrouve une relation entre la contrainte dans le carbure et la déformation moyenne dans le grain.

	Carbure	Grain sélectionné		Six grains voisins	
	$<\sigma_{22}^{c}>$	$<\varepsilon_{22}>_{grain}$	$<\rho>_{grain}$	$<\varepsilon 22>_{grains}$	$<\rho>_{grains}$
	MPa	-	mm^{-2}	-	mm^{-2}
Orientation initiale	267	0,19	65×10^{6}	0,12	63×10^{6}
2ème orientation	217	0,15	23×10^{6}	0,13	79×10^{6}
3ème orientation	214	0,17	57×10^{6}	0,21	44×10^{6}
4ème orientation	246	0,20	25×10^{6}	0,12	16×10^{6}

tableau IV-9 : Contrainte moyenne de traction dans le carbure sélectionné, moyennes dans le grain ou les 6 grains voisins de la déformation dans la direction de traction, de la densité de dislocations, pour quatre tirages des orientations cristallines des grains voisins

Les contraintes moyennes dans le carbure en fonction de la déformation du grain sélectionné dans les trois cas d'études sont réunies sur la figure IV.26.

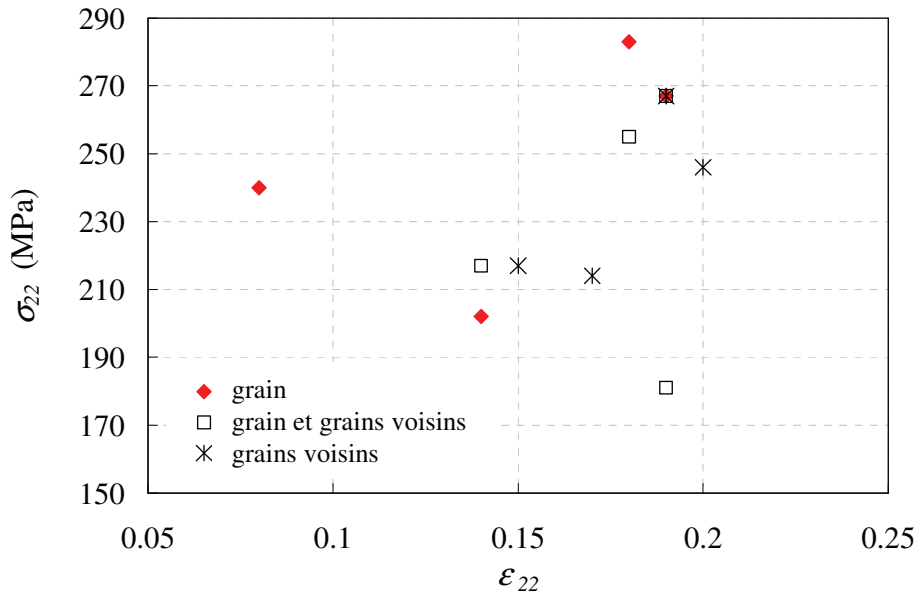


figure IV.26 : Contrainte moyenne de traction dans le carbure ($<\sigma_{22}^{c}>$) en fonction de la déformation axiale moyenne dans le grain contenant le carbure, pour différentes orientations du grain contenant le carbure et/ou des grain voisins

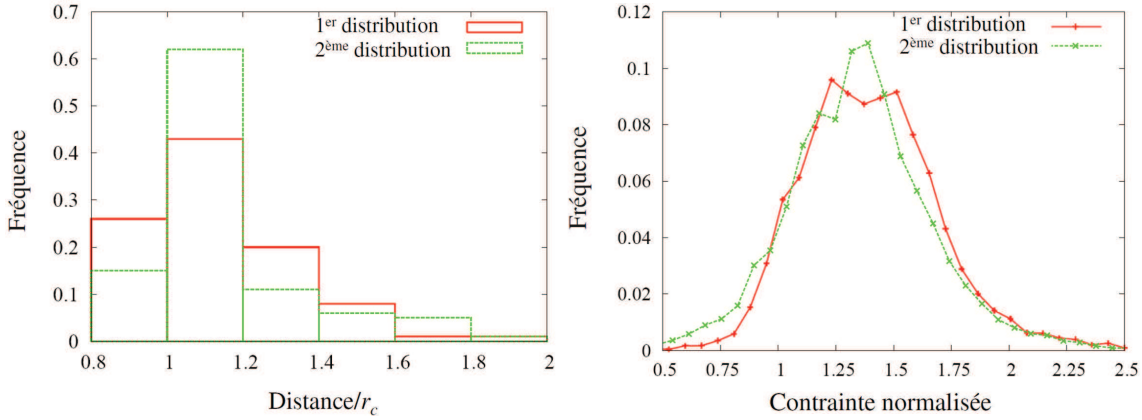
La contrainte moyenne dans le carbure a tendance à augmenter avec la déformation du grain sélectionné. Néanmoins, les évolutions peuvent être assez variable : cela peut être lié à l'important gradient de la déformation dans le grain. Ainsi, si le carbure est situé dans un endroit soumis à une déformation importante, la contrainte dans ce carbure est grande; par contre si dans le même grain, le carbure est situé dans une zone subissant une faible déformation, la contrainte dans le carbure et moins importante. Par ailleurs, la contrainte dans le carbure dépend autant de l'orientation du grain qui le contient que de l'orientation des grains premiers voisins. Il aurait été intéressant de poursuivre cette étude en étudiant l'influence de l'orientation des grains de la seconde couronne de grains, etc.. Cela permettrait de déterminer s'il existe des situations critiques pour les carbures et de définir ces situations par la définition d'un agrégat particulier.

IV.4.3 Influence de la répartition spatiale des carbures

La répartition spatiale des carbures est modifiée en utilisant d'autres tirages aléatoires pour les centres des carbures. La taille des carbures et la distribution des orientations cristallines des grains sont fixes. L'influence de la répartition spatiale des carbures sur les chargements des carbures est étudiée. On réalise 2 tirages avec les carbures répartis uniformément dans la microstructure et 2 tirages pour lesquels on impose aux carbures d'être aux joints de grains.

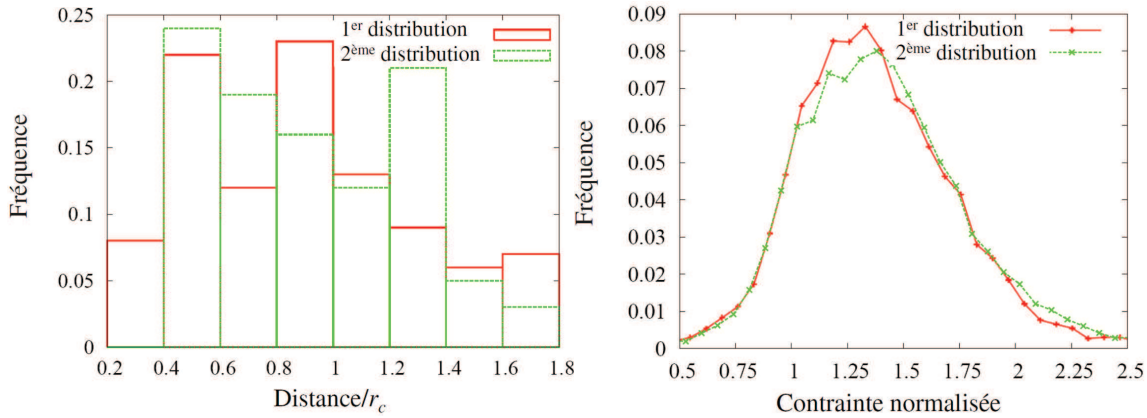
Les tirages sont caractérisés par la distribution de la distance au plus proche voisin (on mesure les distances entre chaque carbure et son plus proche voisin). Les résultats montrent que la deuxième répartition spatiale des carbures est plus homogène (figure IV.27(a)). La distribution des contraintes dans les carbures ne montre pas une grande différence entre les 2 cas (figure IV.27(b)). Dans le cas des carbures aux joints de grains, la distribution de distance au plus

proche voisin indique que la répartition est hétérogène (figure IV.28). Les distributions de contraintes semblent néanmoins sensiblement identiques pour ces 2 distributions, mais le coefficient de variation est plus élevé dans le deuxième cas. Alors que le ratio de la contrainte moyenne dans les carbures par rapport à la contrainte macroscopique ($<\sigma_{22}>_c / \Sigma_{22}$) est moins élevé (figure IV.29).



(a) (b)

figure IV.27 : (a) Distribution de la distance au plus proche voisin (b) Distribution des contraintes dans les carbures, pour deux répartitions spatiales des carbures dans les grains



(a) (b)

figure IV.28 : (a) Distribution de la distance au plus proche voisin (b) Distribution des contraintes dans les carbures, pour deux répartitions spatiales des carbures (carbures aux joints de grains)

La répartition spatiale des carbures est moins homogène quand les carbures sont situés aux joints de grains. Cette dispersion dans la répartition spatiale des carbures mène à une distribution des contraintes plus dispersées par rapport aux carbures localisés aléatoirement dans la microstructure (figure IV.29). Le coefficient de variation est plus élevé dans le cas des carbures aux joints de grains, par contre le rapport $<\sigma_{22}>_c / <\sigma_{22}>_{couche}$ peut être moins important pour ce cas. Les différences restent faibles. Les courbes globales ne dépendent pas de la position des carbures.

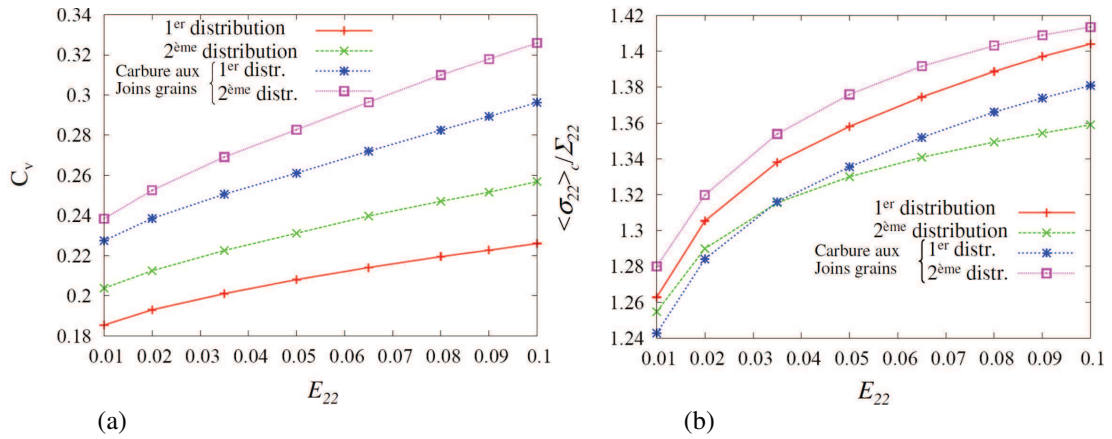


figure IV.29 : (a) Coefficient de variation (b) contrainte moyenne des carbures divisée par la contrainte macroscopique, pour différentes répartitions spatiales des carbures (carbures dans l'agrégat et carbures aux joints de grains)

IV.4.4 Influence de la taille des carbures

Afin étudier l'influence de la taille relative des carbures sur la distribution des contraintes dans les carbures, leur taille est augmentée d'un facteur de 2, mais la distribution des orientations des grains et la répartition spatiale des carbures ne sont pas modifiées. La courbe globale met en évidence un niveau d'écrouissage plus élevé lorsque la taille relative des carbures augmente ; cela s'explique par une fraction volumique plus élevée de la phase élastique (figure IV.30). La distribution des contraintes normalisées dans les carbures indique un décalage de la distribution vers les faibles niveaux de contraintes, même si cela reste faible. Cependant, on peut avoir des variations locales inverses à la tendance générale : le niveau de contrainte dans le carbure sélectionné (le carbure plus chargé défini au paragraphe précédent pour l'étude des orientations locales sur le chargement des carbures): le carbure le plus grand subit une contrainte plus élevée de 6% .

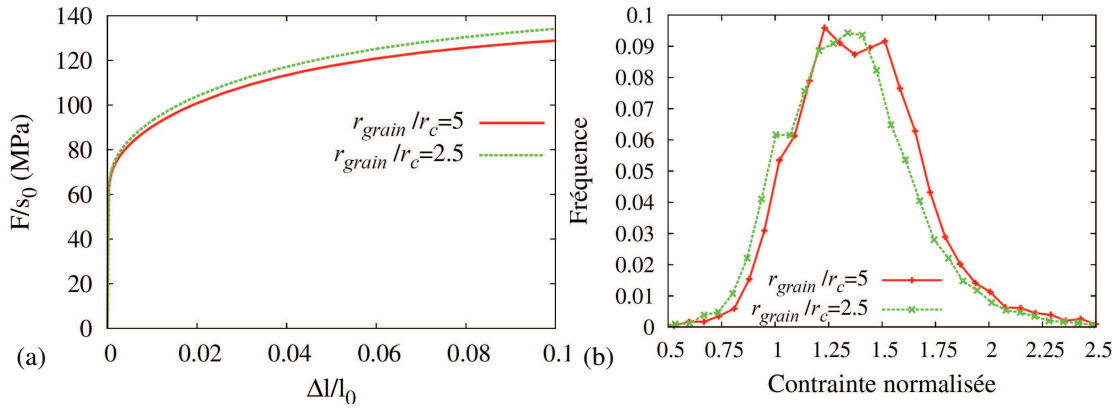


figure IV.30 : (a) Courbes globales de contraintes-déformation (b) Distribution des contraintes dans les carbures en fonction de la taille des carbures par rapport à la taille du grain (r_{grain}/r_c) égale à 5 et 2.5

IV.4.5 Influence de la morphologie des grains

Afin d'étudier l'influence de la morphologie des grains sur la distribution des contraintes dans les carbures, deux types de simulation sont effectués : 1) le déplacement à été imposé dans la direction transverse à la première direction sur la structure hexagonale (traction dans la direction horizontale). La distribution des orientations des grains et la répartition spatiale des carbures restent identiques ; 2) les grains sont modélisés en utilisant les polygones de Voronoï. La distribution initiale des orientations des grains ne peut être identique à celle de la structure hexagonale.

Dans le premier cas, les concentrations des contraintes restent toujours parallèles à la direction de chargement (direction transverse). Les bandes de localisations des déformations se situent à 45° par rapport à la direction transverse. La dispersion des contraintes dans les carbures est moins élevée dans la direction transverse mais le mode de la distribution des contraintes dans les carbures reste quasi-identique (figure IV.33).

Dans le cas des grains polygonaux, on retrouve les mêmes caractéristiques que dans le cas des grains hexagonaux : les concentrations des contraintes de traction (σ_{22}) sont parallèles à l'axe de traction, et sont localisées aux joints des grains ou aux interface particule/grain ; les déformations se localisent à 45° par rapport à l'axe de traction et sont situées plutôt aux joints de grains. Les distributions varient peu avec la forme du grain. Les courbes globales de contrainte-déformation restent identiques.

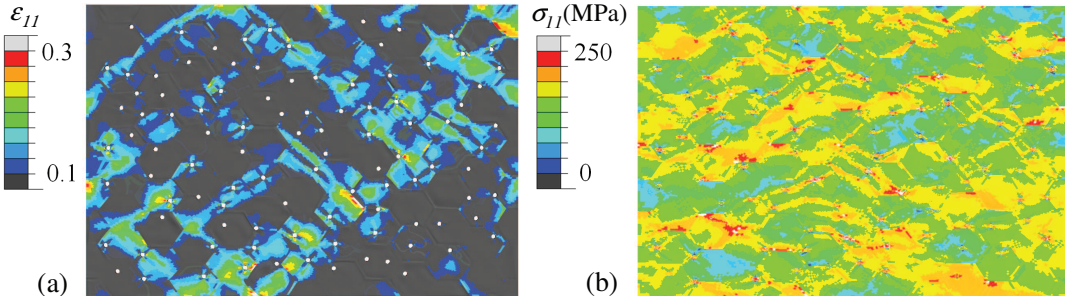


figure IV.31 : (a) Champ de déformation (b) Champ de contrainte axiale, d'un calcul déformations planes après 10% de déformation dans la direction 1 (direction horizontale)

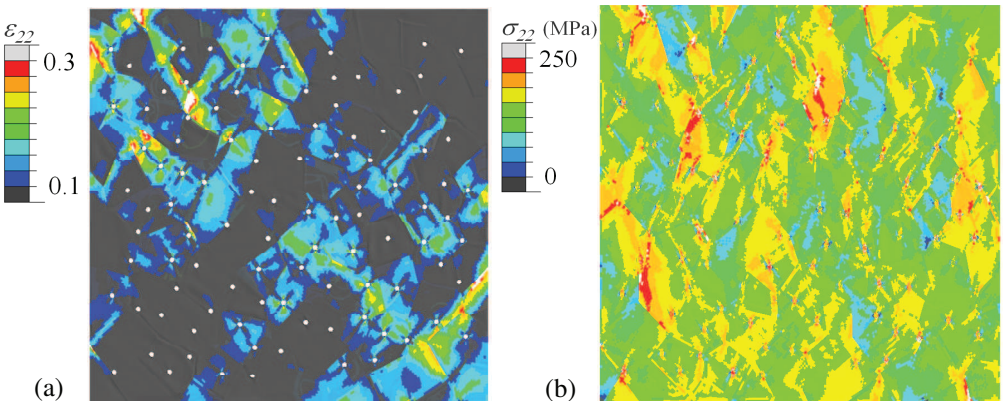


figure IV.32 : (a) Champs de déformation (b) Champs de contrainte axiale d'un calcul en déformations planes après 10% de déformation, avec les grains polyédriques

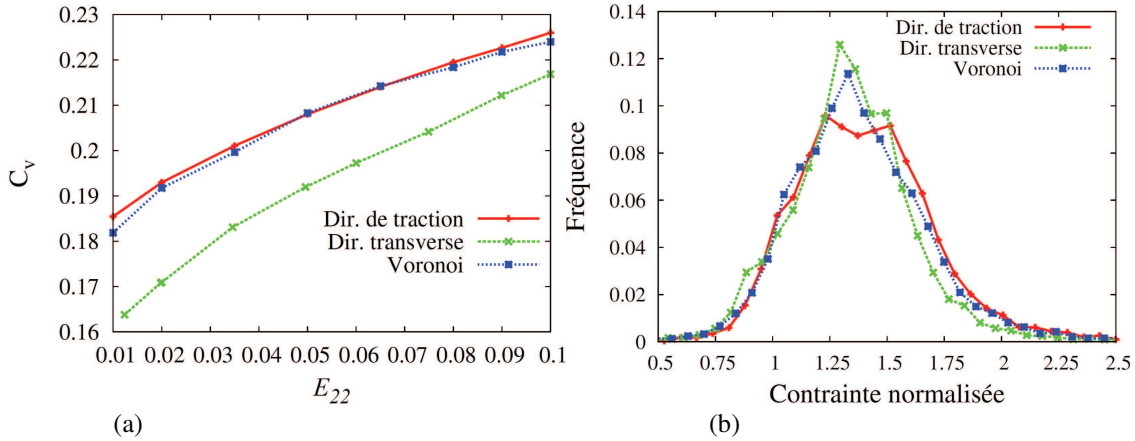


figure IV.33 : (a) Coefficient de variation (b) Distribution des contraintes dans les carbures pour deux calculs avec le chargement en direction de traction et transverse avec les grains hexagonaux et un calcul dans la direction de traction avec les grain polyédriques

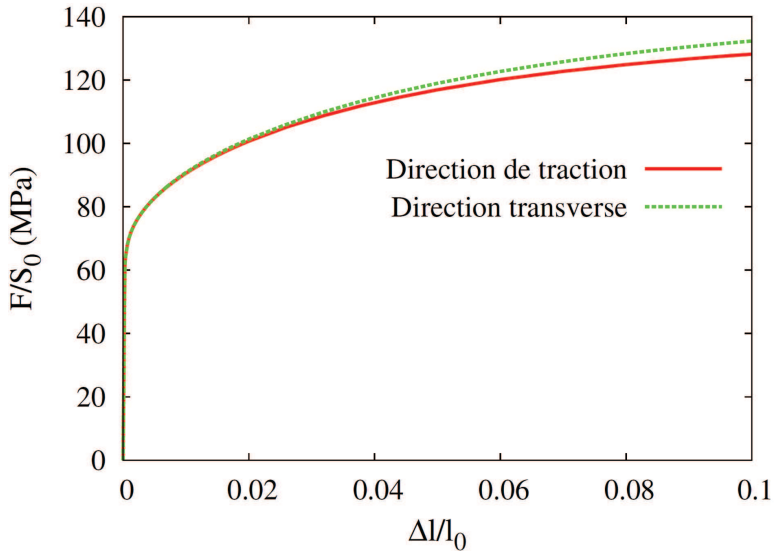


figure IV.34 : Courbes globales contrainte-déformation pour le chargement en direction de traction verticale (« traction ») et de traction horizontale (« transverse ») avec les grains hexagonaux

IV.5 APPLICATION A L'ACIER C35R

IV.5.1 Introduction

L'étude précédente a été réalisée pour un acier sphéroïdisé fictif dont la matrice ferritique aurait le comportement d'un acier IF. L'objectif de cette partie est d'identifier les paramètres du modèle cristallin permettant de simuler le comportement de l'acier C35R sphéroïdisé pour différentes températures.

Le modèle de comportement utilisé est adapté pour les métaux de structure cubique centrée (C.C.). *A priori*, la description des mécanismes de glissement implique que ce modèle soit valable au-delà de la température de transition de comportement. Libert (2007) a développé un modèle de comportement adapté au comportement « basses températures » des aciers C.C.,

prenant en compte les mécanismes de glissement des dislocations par double décrochement. Il a été suivi par N'Guyen (2010). Matthieu (2006) a utilisé un modèle phénoménologique identifié sur des résultats obtenus à basse température.

Dans le cadre de ce travail, le modèle CristalEcp (Erieau et Rey, 2002) basé sur le travail de Tabourot (1992) est repris, pour modéliser le comportement polycristallin aux basses températures. On utilise le modèle de l'étude paramétrique. On fait donc l'hypothèse simplifiée que la température n'a pas d'influence sur les mécanismes de la plasticité à l'échelle microscopique, ou plus exactement que la formulation haute ou basse température ne modifie pas ou peu les champs mécaniques si tant est que le comportement moyen est le même.

Comme on l'a vu précédemment, il y a 12 paramètres dans le modèle cristalECP. Le modèle étant basé sur les mécanismes physiques de la déformation, certains paramètres sont mesurables, mais d'autres paramètres sont à identifier pour représenter le comportement moyen d'un agrégat polycristallin. Pour ce faire, on utilise les simulations par éléments finis. Afin de limiter le temps de calcul, un agrégat simplifié est utilisé.

IV.5.2 Paramètres indépendants de la température

Nous souhaitons identifier le modèle dans la gamme des températures utilisées lors des essais de ténacité (-196°C à -40°C). Certains paramètres doivent donc varier avec la température. La norme du vecteur de Burgers (b), la densité initiale des dislocations (ρ_0), les composantes de la matrice d'interaction des dislocations (a^{su}) sont supposés fixes avec la température et sont pris des travaux de Erieau et Rey (2004). Les coefficients de viscosité $\dot{\gamma}_0$ et n sont déterminés de la même façon. Les paramètres d'élasticité varient avec la température, mais cette variation est faible, on la négligera par rapport à la variation des paramètres pilotant la plasticité.

Dans la loi d'évolution de la densité de dislocations, le diamètre du grain intervient. Il est identifié par les observations microstructurales du matériau étudié (C35R). Les valeurs de ces différents paramètres sont présentées dans le tableau IV-10. Les calculs ont été réalisés avec une taille de grains de 15 µm alors qu'ils auraient dû être faits avec une taille de grains de 10 µm. Néanmoins, nous avons vérifié que le comportement serait peu modifié.

E (MPa)	ν	n
210000	0,3	100
$\dot{\gamma}_0$ (s^{-1})	b (nm)	ρ_0 (m^{-2})
10^{-11}	0,25	15×10^9
a^{ss}	a^{su}	D (mm)
0,25	0,25	0,015

tableau IV-10. Paramètres du modèle cristallin indépendants de la température

IV.5.3 Evolution de la cission critique

La limite d'élasticité supérieure et inférieure du matériau étudié est présentée dans le chapitre 2 pour les différentes températures. Ces deux limites d'élasticité sont liées au crochet de traction et au palier de Lüders présents dans les essais de traction simple. Cet effet est en partie un effet

structural et dépend de la géométrie de l'éprouvette. Il conduit à un renforcement des localisations de déformation en pointe de fissure mais ne modifie pas la taille de la zone plastique (Rezaee, 2007, Belotteau, 2009). Ce phénomène est une manifestation du vieillissement statique. Actuellement, on ne sait pas comment il intervient dans le phénomène de clivage et il n'a pas été pris en compte dans les prédictions de la transition ductile-fragile réalisées jusqu'à présent. Il ne sera pas abordé dans ce travail dont l'objectif est de déterminer si les hétérogénéités de déformation à l'échelle cristalline peuvent apporter des explications sur l'évolution de la ténacité dans la transition. Afin d'identifier la limite d'élasticité sans prendre en compte le vieillissement statique, on a identifié une loi de Ludwik sur les courbes contrainte-déformation après le palier de Lüders. L'identification de l'écrouissage avec la loi de Ludwik donne une limite d'élasticité et deux paramètres de l'écrouissage (K_H et n_H) :

$$\sigma_{eq}(T) = \sigma_{0H}(T) + K_H(T)\left(\varepsilon_{eq}^{p}\right)^{n_H(T)} \qquad \text{(IV.1)}$$

Les valeurs des paramètres sont présentées dans le chapitre III. A l'échelle cristalline, cette expression devient :

$$\tau_c^s(T,\rho) = \tau_0(T) + \mu b\sqrt{\sum_u a^{su}\rho^u} \qquad \text{(IV.2)}$$

avec τ_c la cission critique sur le système de glissement s, τ_0 la contrainte de friction de réseau, a^{su} la matrice d'interaction entre les différents systèmes de glissement s et u, μ le module de cisaillement et ρ^u est la densité de dislocation sur le système de glissement activé u. La valeur de la contrainte τ_0 aux différentes températures, peut donc être déduite en utilisant l'équation (IV.2) en conservant les autres paramètres déjà fixés et en écrivant : $m_T\tau_c^s(T,\rho_0) = \sigma_{0H}$, avec m_T le facteur de Taylor. Les valeurs de τ_0 ainsi obtenues sont utilisées comme valeurs initiales dans la procédure d'identification de ce paramètre τ_0.

IV.5.4 Paramètres de la loi d'évolution de la densité de dislocations

L'évolution des densités de dislocations est reliée au libre parcours moyen des dislocations L^s (la distance parcourue en moyenne par une dislocation avant de rencontrer un obstacle) et la distance caractéristique d'annihilation des dislocations, g_c :

$$\dot{\rho}^s = \frac{1}{b}\left(\frac{1}{L^s} - 2g_c\rho^s\right)\left|\dot{\gamma}^s\right| \qquad \text{(4.3)}$$

où b est la norme du vecteur de Burgers, ρ^s la densité de dislocations sur le système de glissement activé s et $\dot{\gamma}^s$ le taux de glissement plastique sur ce système de glissement activé. On rappelle que le libre parcours moyen est relié à la densité de dislocations en introduisant un paramètre K :

$$\frac{1}{L^s} = \frac{\sqrt{\sum_{u\neq s}\rho^u}}{K} + \frac{1}{D} \qquad \text{(4.4)}$$

où D est le diamètre du grain. On propose d'identifier les paramètres K et g_c en fonction de la température afin de rendre compte de l'évolution de l'écrouissage avec la température. Dans un

premier temps, on suppose que K est fixe et on identifie le paramètre $g_c(T)$. Ce paramètre correspond à l'annihilation des dislocations. Il diminue avec la température à cause de sa nature thermiquement activée. On fixe g_c à 0nm afin de ne pas prendre en compte l'effet d'annihilation des dislocations à -196°C (Libert, 2007). On fixe la valeur de g_c à 8nm à 20°C. Cette valeur correspond à 32*b*, valeur identifiée par Erieau et Rey (2004) et Libert (2007). Les valeurs de g_c entre les températures -150 et -40°C sont choisies entre 1 et 6nm selon le profil présenté sur la figure IV.35.

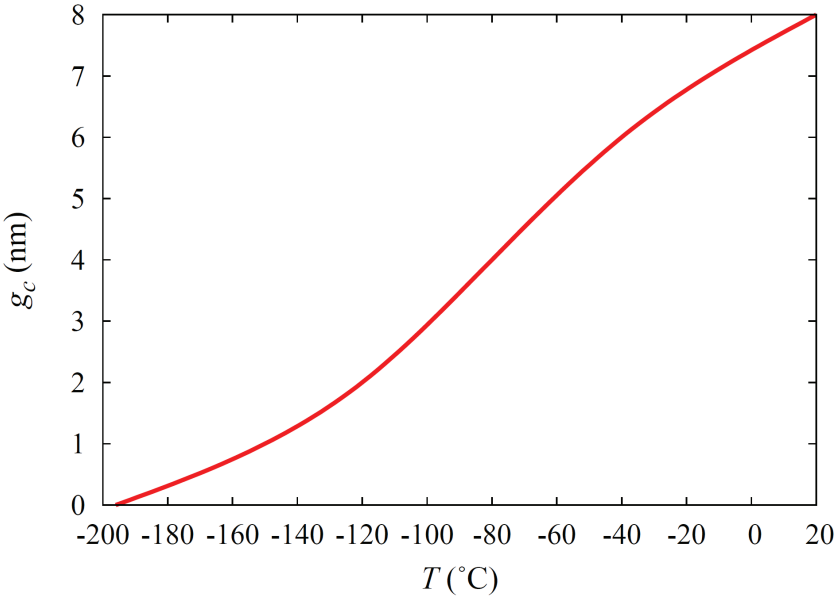


figure IV.35. Evolution du paramètre g_c en fonction de la température

La valeur initiale du paramètre K peut être calculée en utilisant l'équation (4.4). La valeur initiale de K est K=40 ; on note que cela correspond environ au libre parcours moyen initial L^s de l'ordre de 70% de la taille du grain.

Les valeurs finales des paramètres $\tau_0(T)$ et $K(T)$ seront identifiées à l'aide des simulations éléments finis sur un agrégat pseudo-cristallin aux températures -196, -150°C, -120°C, -80, -40 et 20°C.

IV.5.5 Agrégat pseudo-polycristallin

Afin d'identifier les paramètres du modèle cristallin, plusieurs calculs sont réalisés sur un agrégat polycristallin. Les courbes contrainte-déformation rationnelles obtenues par ces simulations sont comparées avec celles des résultats des essais de traction simple et les paramètres sont identifiés afin de minimiser l'écart entre ces courbes. L'agrégat est constitué de 512 grains cubiques composés de 8 éléments de type C3D8R (4096 éléments linéaires à 8-noeuds, avec intégration réduite) (Libert, 2008). Les orientations cristallines sont issues d'un tirage aléatoire selon une texture isotrope. Les conditions aux limites de traction simple sont appliquées à l'agrégat et un déplacement de 15% de la hauteur de l'agrégat est imposé. Ce déplacement correspond à la déformation de striction et les identifications seront réalisées jusqu'à ce niveau de déformation globale. Les faces de l'agrégat sont libres.

La figure IV.36 montre un exemple de calcul éléments finis sur l'agrégat. Les courbes globales contrainte-déformation obtenues sont comparées aux résultats expérimentaux pour différentes températures et différents paramètres du model cristallin.

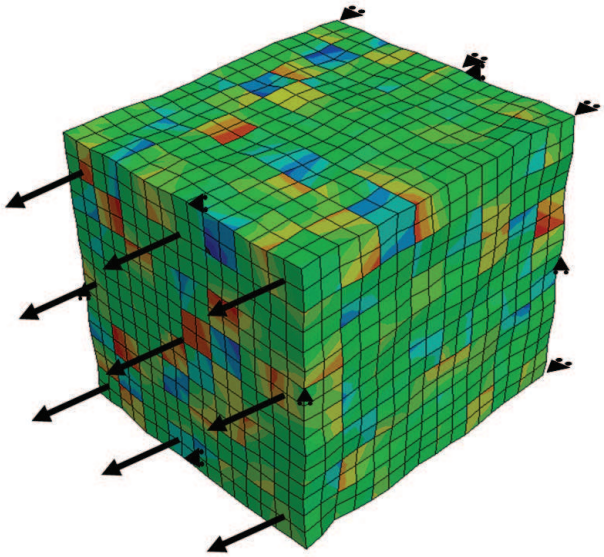


figure IV.36. Agrégat cristallin utilisé pour les identifications

IV.5.6 Résultats des identifications

Les paramètres de $\tau_0(T)$ et $K(T)$ sont identifiés à partir des résultats expérimentaux à toutes les températures étudiées et sont présentés dans le tableau IV-11. L'évolution du paramètre $\tau_0(T)$ en fonction de la température (figure IV.37(a)) a la même allure que l'évolution de la limite d'élasticité en fonction de la température comme prévue. L'évolution du paramètre $K(T)$ tend vers un plateau à partir de la température de -80°C (figure IV.37(b)), mais l'augmentation du paramètre K est importante en-dessous de cette température. Aux basses températures, le terme de création des dislocations est plutôt contrôlé par la taille du grain, car les grandes valeurs de K font éliminer la dépendance à ce terme de la densité des dislocations dans l'équation (4.4) et seul la taille de grain intervient dans cette équation.

Température	τ_0	K
°C	MPa	
-196	259	460
-150	192	109
-120	155	71
-80	117	48
-40	108	42
20	64	38

tableau IV-11. Valeurs finales des paramètres τ_0 et $K(T)$

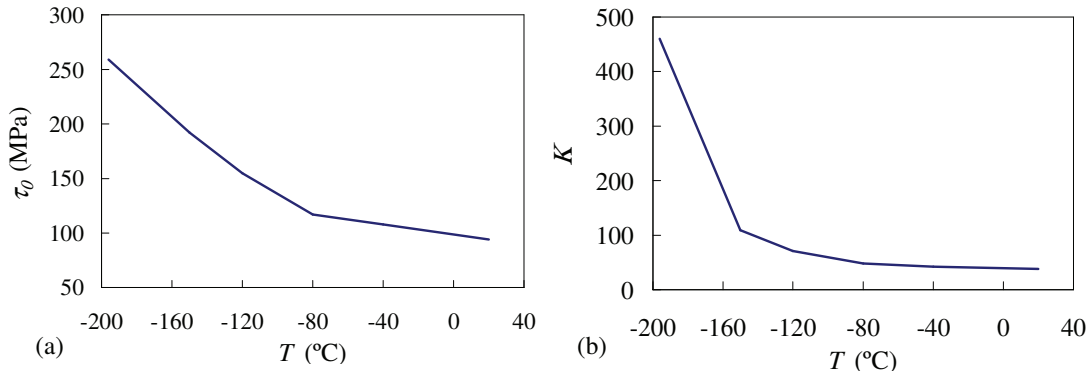


figure IV.37 : Evolution des paramètres τ_0 (a) et K (b) en fonction de la température

La figure IV.38 montre la comparaison entre les courbes macroscopiques de contrainte-déformation et celles obtenues par les essais traction simple. Les paramètres sont identifiés sur les courbes simulées après le palier de Lüders jusqu'à la déformation de striction.

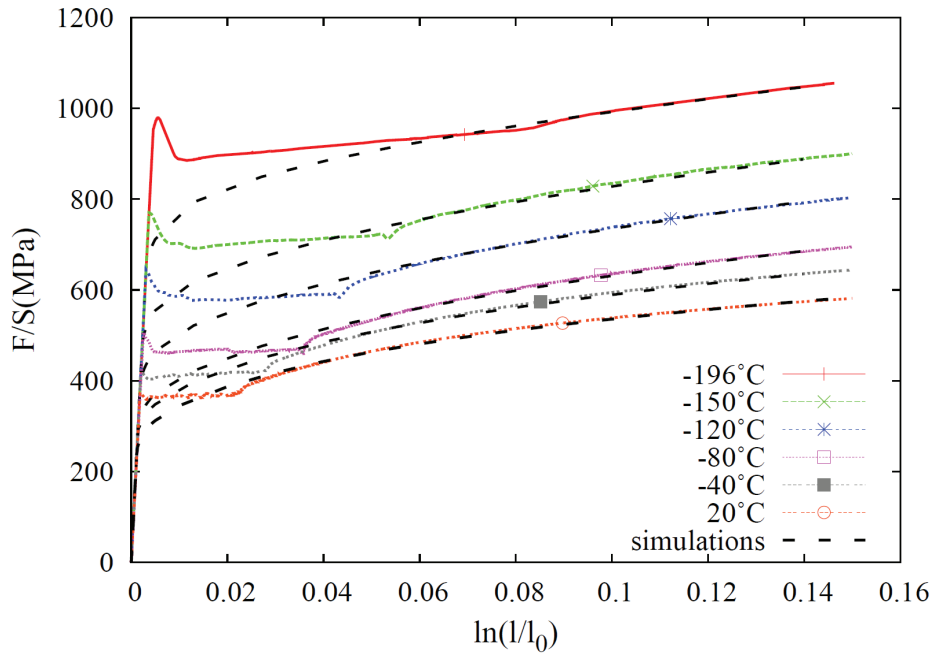


figure IV.38. Comparaison des courbes expérimentales et celles obtenue par les simulations éléments finis à 10^{-4} s^{-1}

L'augmentation du paramètre K s'explique avec l'évolution des sources des dislocations aux basses températures : les sources des dislocations deviennent moins importantes lorsque la température diminue. Cela conduit aux valeurs élevées de K aux basses températures : à -120°C la valeur de K est 4 fois plus élevée qu'à 20°C. Les valeurs plus élevées de K à -150 et -196°C en présence des valeurs assez petites de g_c liées à l'absence du terme d'annihilation conduisent à une évolution linéaire de la densité des dislocations en fonction du taux de glissement (équation(4.3)). Ce phénomène est plus marqué à -196°C (équation(IV.5))

$$\dot{\rho}^s = \frac{|\dot{\gamma}^s|}{bD} \qquad \text{(IV.5)}$$

où b est la norme du vecteur de Burgers et D est le diamètre du grain.

L'exposant de la sensibilité à la vitesse de déformation (n) dans le modèle cristallin est fixé à 100. Cette valeur est proposée par Erieau et Rey (2004) pour un acier ferritique (IF) à température ambiante. Afin de vérifier ce coefficient, les courbes de contrainte-déformation à -150 et -40°C obtenues par les essais traction à une vitesse de déformation égale $10^{-3}s^{-1}$ sont comparées aux simulations éléments finis effectuées à cette vitesse (figure IV.39). Les résultats obtenus avec n égal à 100 sont satisfaisants.

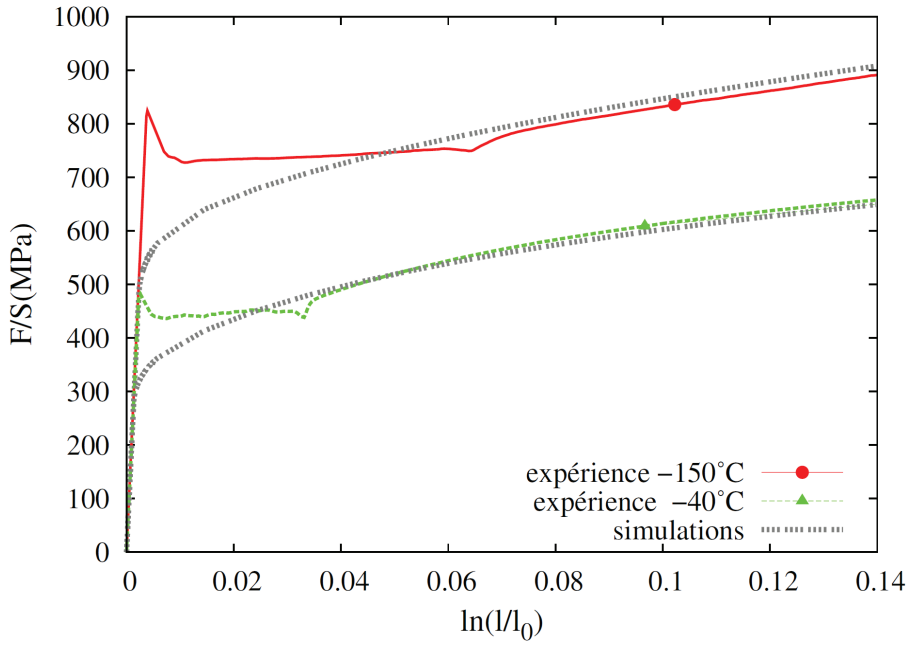


figure IV.39. Comparaison des courbes contrainte-déformation expérimentales et simulées à -150 et -40°C (vitesse de déformation $10^{-3}s^{-1}$)

On doit noter qu'une étude avec la loi de littérature (acier IF) de l'effet des fonctions $g_c(T)$ et $K(T)$ sur le comportement global de l'agrégat, ainsi que sur la distribution de contraintes dans les carbures, a été réalisée et est présentée en annexe E. Les résultats montrent que pour les différents jeux de paramètres testés, si le comportement global est le même, la distribution de contraintes dans les carbures ne varie pas. Cela laisse penser que les subtilités des mécanismes de glissement à l'échelle cristalline ne sont pas du premier ordre dans la description des hétérogénéités des champs mécaniques si on s'intéresse à un volume élémentaire. Ce résultat reste néanmoins à confirmer.

IV.6 CONCLUSION PARTIELLE

Des microstructures idéalisées d'un matériau polycristallin comportant 1% en fraction volumique de particules élastiques linéaires isotropes ont été simulées. Elles sont représentées en coupe par des grains hexagonaux ou polygonaux dont les orientations cristallines sont tirées aléatoirement selon une fonction de distribution d'orientations cristallines isotrope. Les carbures sont répartis uniformément soit dans la microstructure, soit le long des joints de grains. Le comportement cristallin défini par Tabourot pour les structures cubiques centrées est utilisé.

Une étude paramétrique basée sur un comportement cristallin type ferritique tiré de la littérature est réalisée. Nous nous intéressons à la distribution des contraintes de traction dans les carbures.

Le rapport entre la contrainte moyenne dans tous les carbures et la contrainte macroscopique, ainsi que la dispersion de ces contraintes augmentent avec la déformation macroscopique. La comparaison avec un calcul dans lequel le matériau polycristallin est remplacé par un milieu homogène équivalent montre que le coefficient de variation est 4 fois supérieur dans le cas polycristallin pour une valeur moyenne qui diffère de 10% au maximum : l'hétérogénéité cristalline joue un rôle important dans la dispersion du chargement des particules fragiles.

Les propriétés globales de la microstructure dépendent faiblement de la distribution des orientations cristallines des grains. La distribution des contraintes dans les carbures varie peu. En revanche, le chargement d'un carbure dépend de l'orientation du grain qui le contient et de ses voisins. De manière générale, plus la déformation (dans la direction de traction) dans le grain est importante, plus le carbure est chargé. Cependant, il n'a pas été possible de déterminer la relation entre le chargement du grain et les désorientations locales. De nombreuses simulations seraient nécessaires, en s'intéressant aux premiers voisins mais aussi aux seconds voisins, etc. afin de déterminer s'il existe des situations critiques pour le clivage s'expliquant par des relations d'orientations cristallines entre grains voisins.

La distribution des contraintes dans les carbures est peu sensible à la distribution spatiale des carbures pour une fraction volumique de carbures et une distribution d'orientations cristallines des grains donnée. En mettant les carbures aux joints de grains, la distribution des contraintes des carbures est plus dispersée. Cela peut être lié au fait que dans ce cas, la distribution spatiale des carbures est moins homogène. Les effets restent limités.

La taille relative des carbures par rapport aux grains n'a pas d'influence pour les cas testés.

Le comportement global de l'agrégat et la distribution des contraintes dans les carbures ne dépendent pas de la morphologie des grains. Ainsi, le choix des grains hexagonaux n'est pas un choix critique.

En conclusion, la distribution des contraintes dans les carbures varie peu avec la distribution des orientations cristallines des grains, la distribution spatiale des carbures et la morphologie des grains. Cependant, la localisation des carbures aux joints est un facteur augmentant la dispersion du chargement des particules. La microstructure ainsi simulée n'est pas exactement un volume élémentaire représentatif vis-à-vis de la distribution des contraintes de traction dans les carbures. Quelques simulations seront nécessaires pour obtenir cette distribution qui sera utilisée dans les approches probabilistes de la rupture fragile pilotée par la rupture des particules.

Le modèle cristallin est finalement identifié pour rendre compte du comportement en fonction de la température de l'acier C35R sphéroïdisé. Les paramètres dépendants de la température sont la cission critique et les paramètres de libre parcours moyen et d'annihilation des dislocations. Une fonction dépendante de la température est imposée pour le paramètre d'annihilation des dislocations basée sur les résultats de la littérature. Les deux autres paramètres sont identifiés grâce aux résultats des essais de traction. Le comportement sera utilisé dans le chapitre suivant pour étudier l'influence de la température sur le chargement des particules.

CHAPITRE V.
MODELES PROBABILISTES DE LA RUPTURE PAR CLIVAGE

TABLE DES MATIERES

CHAPITRE I. MODELES PROBABILISTES DE LA RUPTURE PAR CLIVAGE 107

V.1 INTRODUCTION 108

V.2 EFFET DE LA TEMPERATURE SUR LA DISTRIBUTION DES CONTRAINTES DANS LES CARBURES 108

V.2.1 Influence de la température sur l'hétérogénéité des champs mécaniques 108

V.2.2 Fonction de distribution des contraintes dans les carbures 112

V.3 PROBABILITE ELEMENTAIRE DE MICROFISSURATION 115

V.3.1 Distribution spatiale des carbures 115

V.3.2 Influence de la contrainte critique 117

V.4 PROBABILITE DE RUPTURE PILOTEE PAR LA GERMINATION 118

V.4.1 Démarche 118

V.4.2 Prédiction de la ténacité 119

V.5 PROBABILITE DE RUPTURE PILOTEE PAR LA PROPAGATION 121

V.5.1 Critère de Griffith.....121

V.5.2 Influence de la distribution de taille des carbures 124

V.5.3 Influence de la fraction des carbures fissurés et émoussés 131

V.6 CONCLUSION PARTIELLE 135

V.1 INTRODUCTION

Une modélisation simplifiée de la microstructure d'un matériau polycristallin comportant des particules fragiles a été réalisée et présentée au chapitre précédent. Le comportement cristallin de l'acier C35R a été identifié en fonction de la température. Ce chapitre présente une étude de l'effet de la température sur l'hétérogénéité des champs mécanique dans la microstructure et son influence sur la distribution des contraintes dans les carbures, ainsi que la formulation d'une probabilité élémentaire de la rupture basée sur le critère de germination des microfissures.

La probabilité de rupture macroscopique est développée dans cette partie. Elle est appliquée à une éprouvette SENT aux températures de -196, -150 et -120°C. Les probabilités de rupture basée sur les critère de germination et propagation sont comparées.

V.2 EFFET DE LA TEMPERATURE SUR LA DISTRIBUTION DES CONTRAINTES DANS LES CARBURES

Afin d'étudier l'influence de la température sur l'hétérogénéité des contraintes moyennes dans les carbures, des calculs de microstructure sont effectuées à -196°C, -150°C, -120°C, -80°C, -40°C et à 20°C. La génération de la microstructure a été présentée dans le chapitre IV : chaque microstructure générée contient 12×9 grains hexagonaux et 100 carbures répartis aux joints de grains qui représentent mieux la microstructure critique du C35R (voir chap. III). Trois répartitions spatiales des carbures sont créées. Trois distributions d'orientations cristallines sont associées à chaque géométrie. Neuf agrégats sont ainsi construits et neuf simulations sont réalisées pour chaque température. Ceci nous permettra d'avoir une meilleure représentativité de la distribution des contraintes dans les carbures. Les paramètres du modèle cristallin ont été identifiés dans le chapitre précédent pour toutes les températures étudiées, et sont utilisés dans ce travail.

V.2.1 Influence de la température sur l'hétérogénéité des champs mécaniques

Les bandes de localisation de déformations sont comparées aux différentes températures. Deux exemples des champs de déformation axiale dans la direction de traction après 11% de déformation plastique équivalente moyenne aux températures de -196 et 20°C pour la même distribution d'orientations cristallines et la même répartition spatiale des carbures, sont présentés sur la figure V-1.

Les champs des contraintes axiales dans la direction de traction sont présentés pour une échelle de contrainte entre 0 et 1500MPa pour les températures de -196, -120, -40 et 20°C (figure V-2) pour une distribution d'orientations cristallines et une répartition spatiale des carbures fixées. La répartition spatiale des concentrations de contraintes est indépendante de la température, seul le niveau varie en relation avec la scission critique des systèmes de glissement, laquelle diminue lorsque la température augmente.

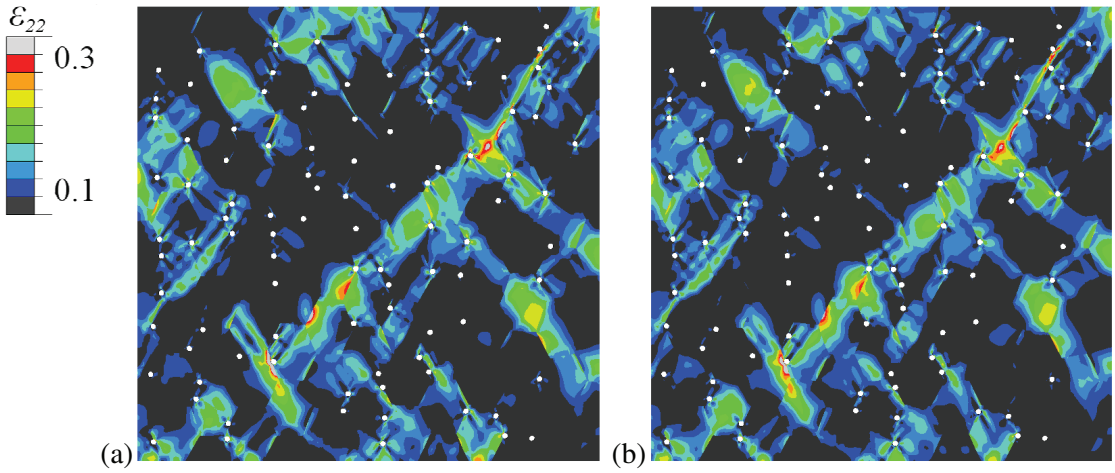


figure V-1: Champs de déformation axiale ε_{22} dans la matrice (a) à -196°C (b) 20°C, après 11% de déformation plastique équivalente moyenne

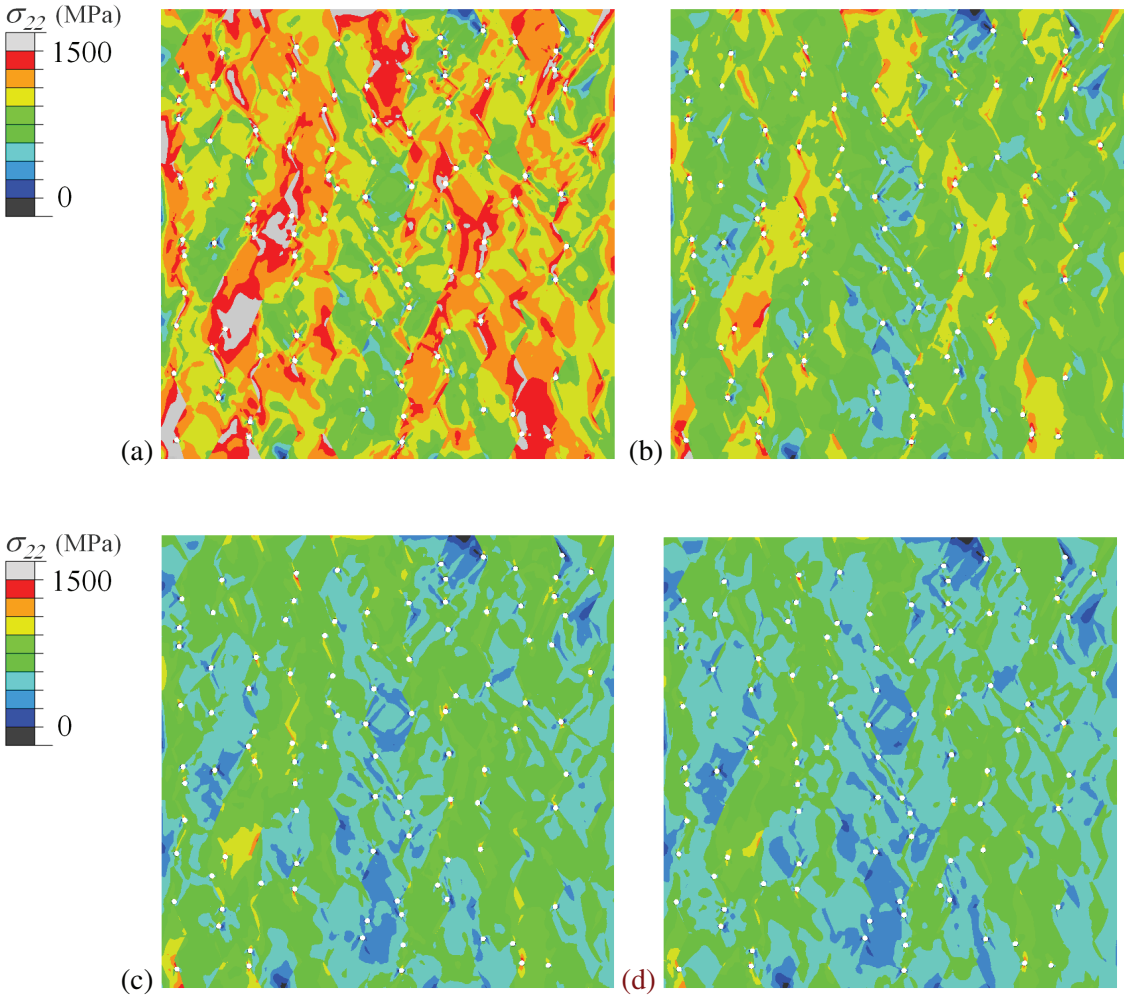


figure V-2 : Champs de contrainte axiale σ_{22} dans la matrice (a) à -196°C (b) à -120°C (c) -40°C (d) 20°C, après 11% de déformation plastique équivalente moyenne

La dispersion des contraintes dans les carbures rapportée à la valeur moyenne est représentée par le coefficient de variation, C_v. Ce coefficient est une fonction croissante de la déformation

macroscopique pour toutes les températures (figure V-3) ; nous retrouvons les résultats du chapitre IV. La dispersion relative des contraintes dans les carbures augmente avec l'augmentation de la température.

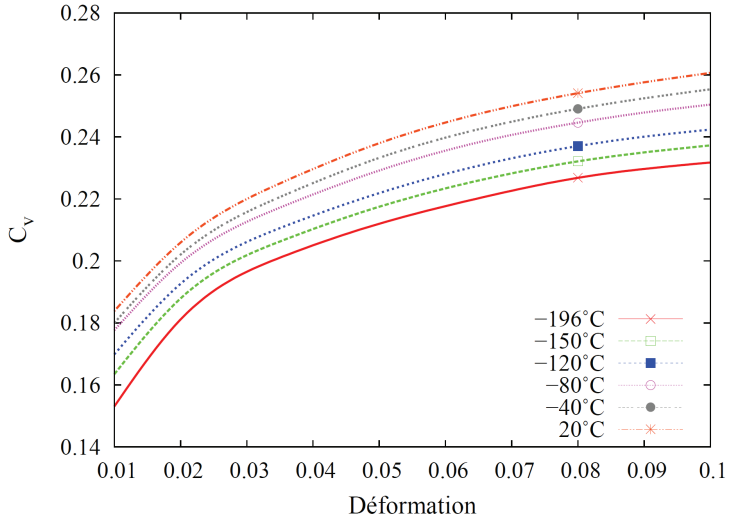


figure V-3 : Coefficients de variation des contraintes dans les carbures en fonction de la déformation macroscopique de traction aux différentes températures

Afin d'obtenir une distribution moyenne des contraintes dans les carbures, celles-ci sont calculées pour chaque microstructure générée. La figure V-4 montre les distributions cumulées pour 6 cas de microstructures à -196°C et après 11% de déformation plastique équivalente moyenne. Les 6 cas correspondent à des distributions spatiales des carbures différentes, pour différentes distributions d'orientations cristallines. Les distributions des contraintes de chaque cas de répartition spatiale des carbures restent proches et les différences diminuent pour les fortes valeurs de contrainte. Il n'est pas évident de conclure sur l'influence de la répartition spatiale ou de la distribution d'orientations cristallines sur la distribution des contraintes.

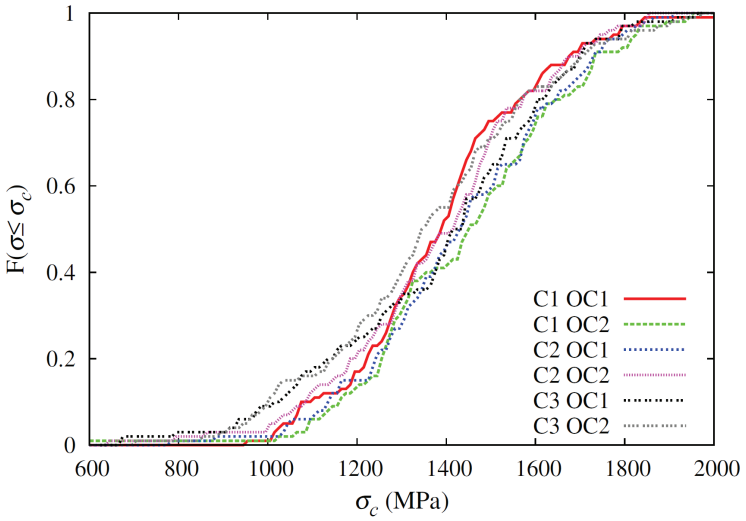


figure V-4 : Distribution cumulée des contraintes dans les carbures pour différents cas de répartition spatiale des carbures et distributions des orientations cristallines (C : répartition spatiale des carbures, OC : orientations cristallines)

Une distribution cumulée des contraintes moyennes dans les carbures est attribuée à chaque niveau de température et de déformation, en faisant la moyenne des résultats des 9 agrégats. Ces calculs sont effectués aux niveaux de déformation plastique équivalente moyenne de 2,2, 5,7, 9 et 11% correspondant à 2, 5, 8 et 10% de déformation conventionnelle de traction. La figure V-5 montre les distributions cumulées des contraintes dans les carbures pour différents niveaux de déformation et à différentes températures. On retrouve les résultats mis en évidence par l'étude du coefficient de variation et de la contrainte moyenne avec la déformation : la distribution s'élargit lorsque la déformation augmente. L'écart entre la distribution pour des déformations de 2,2 et 5,7% est plus important que celui entre 5,7 et 9%. Cela est dû à l'écrouissage qui diminue lorsque la déformation augmente.

La figure V-6 montre les distributions cumulées à plusieurs températures pour deux niveaux de déformation. L'écart entre ces distributions est plus grand lorsque la température diminue. Cette évolution suit celle de la limite d'élasticité en fonction de la température : sa variation est plus importante en-deçà de -80°C. La distribution est plus large à basse température, malgré un coefficient de variation plus faible car la contrainte moyenne est plus élevée.

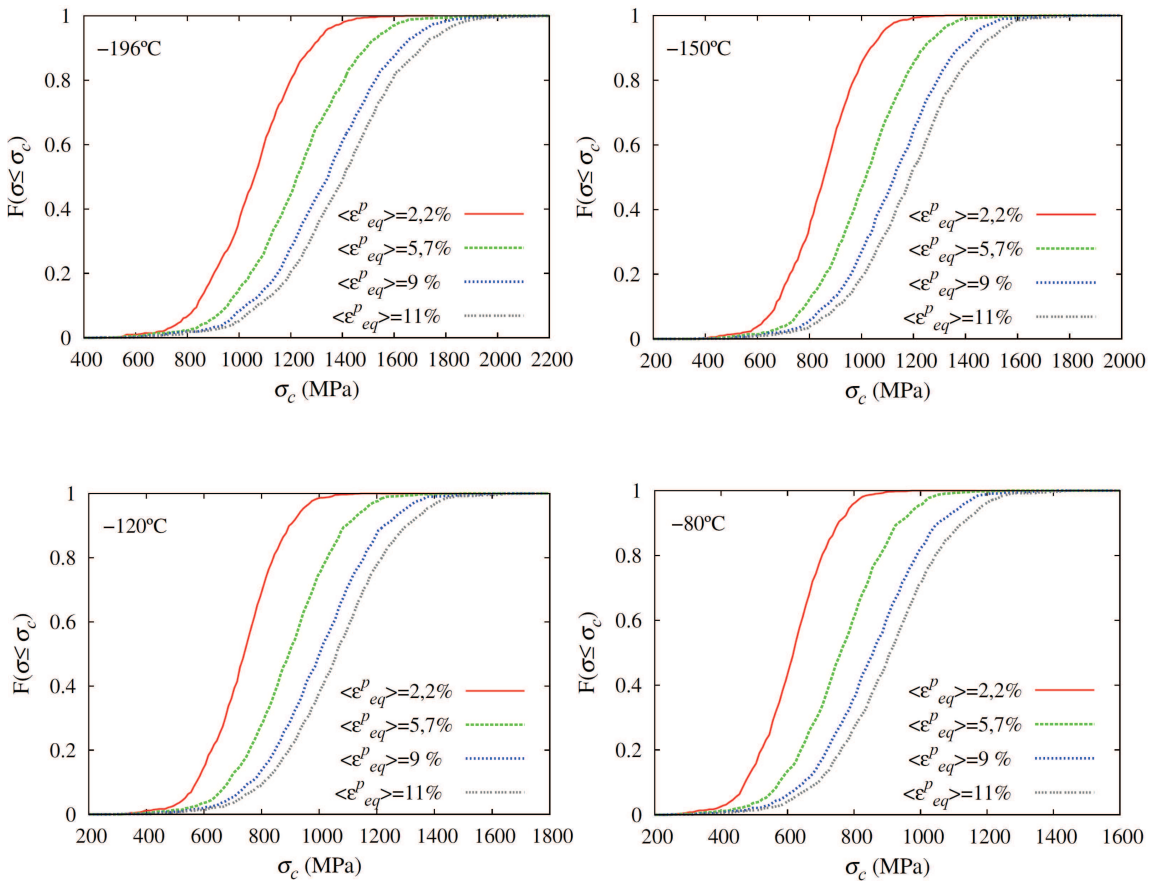


figure V-5 : Distributions cumulées des contraintes dans les carbures pour différents niveaux de déformation plastique équivalente moyenne aux températures de -196, -150, -120°C, -80°C

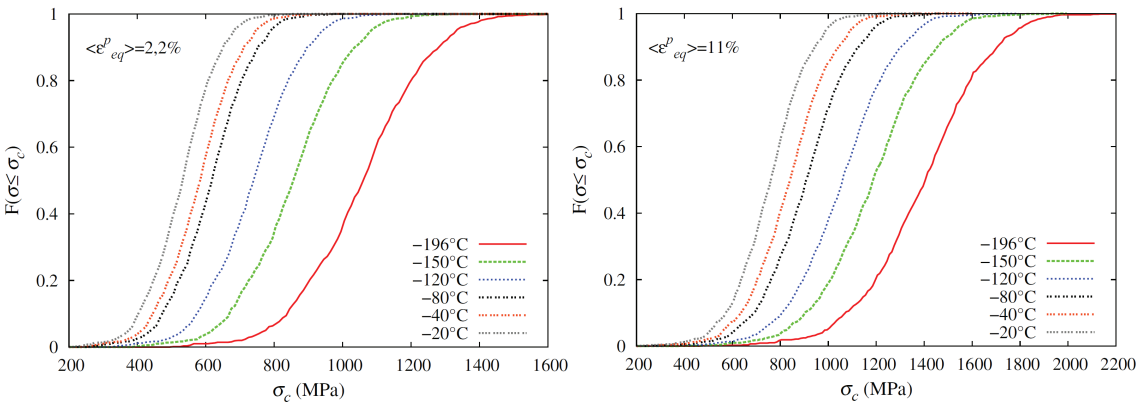


figure V-6 : Distributions cumulées des contraintes dans les carbures aux différentes températures après 11% de déformation plastique équivalente moyenne

V.2.2 Fonction de distribution des contraintes dans les carbures

La distribution cumulée des contraintes moyennes dans les carbures est représentée par une fonction de type Weibull. Cette distribution permettra de rendre compte de la non-linéarité et de la dissymétrie de la densité de distribution. La fraction du nombre de carbures subissant une contrainte de traction inférieure ou égale à σ_c, est donnée par :

$$F\left(\sigma_{22}^{c} \leq \sigma_{c}\right) = 1 - \exp\left(-\left(\frac{\sigma_{c}}{\sigma_{u}(<\varepsilon_{eq}^{p}>,T)}\right)^{m}\right) \qquad \text{(V.1)}$$

où σ_{22}^{c} est la contrainte de traction moyenne dans un carbure, $<\varepsilon^{p}_{eq}>$ la moyenne de la déformation plastique équivalente cumulée, T, la température absolue, m est le paramètre de forme et σ_u le paramètre d'échelle pour une distribution de Weibull.

Pour chaque température, à différents niveaux de chargement (déformation plastique équivalente moyenne de 2,2, 5,7, 9 et 11%), un jeu de paramètres (m et σ_u) est identifié. Le paramètre m varie très peu avec la température et la déformation et peut être considéré constant (m=6). En revanche le paramètre σ_u varie avec la température et la déformation. Le paramètre de σ_u est une fonction croissante de $<\varepsilon^{p}_{eq}>$ (figure V-7).

La valeur de σ_u peut être reliée à la déformation plastique équivalente moyenne, par une équation de type Ludwik :

$$\sigma_u = \sigma_{0H}(T) + \alpha_H(T).(<\varepsilon_p^{eq}>)^{\beta_H} \qquad \text{(V.2)}$$

On peut considérer σ_{0H} comme la limite d'élasticité ou $m_T\tau_c$ (m_T est le facteur de Taylor et τ_c est la scission critique sur chaque système de glissement). Les valeurs obtenues sont légèrement différentes de celles du tableau III.2. L'évolution de σ_u en fonction de la déformation plastique est différente de celle du comportement macroscopique du matériau. On prend la valeur de β_H égale à 0,45 qui est de l'ordre de grandeur de l'exposant de la loi de Ludwik identifiée pour le comportement global de l'agrégat aux différentes températures. Donc, le seul paramètre à identifier est α_H. Les valeurs de σ_{0H} et α_H sont présentées sur le tableau V-1 pour différentes températures.

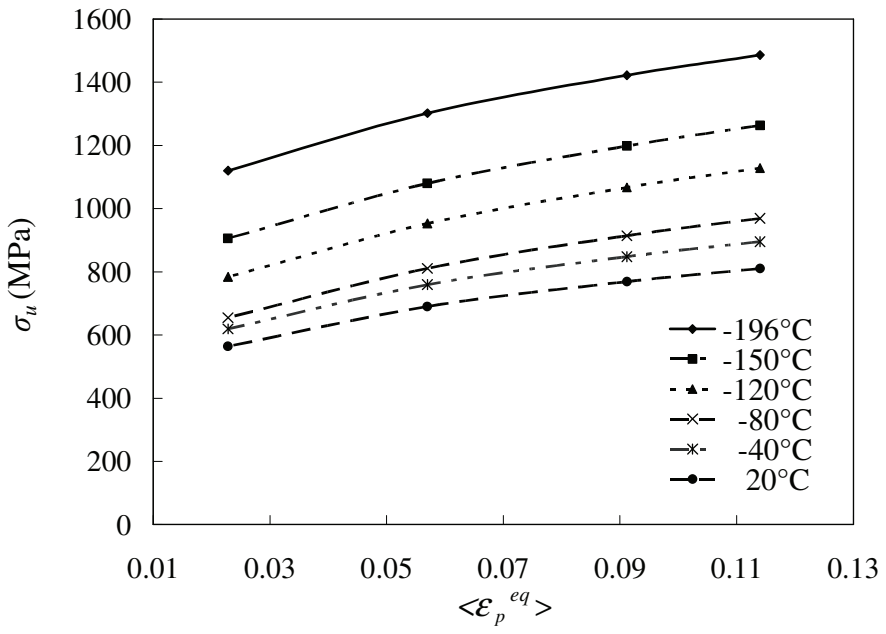


figure V-7 : Évolution du paramètre σ_u en fonction de la moyenne de la déformation plastique équivalente cumulée pour différentes températures

Température	σ_{0H} (MPa)	α_H (MPa)
-196°C	795	1834
-150°C	594	1767
-120°C	483	1707
-80°C	369	1596
-40°C	342	1488
20°C	300	1383

tableau V-1 : Valeurs de σ_{0H} et α_H pour différents températures

Les distributions cumulées des contraintes moyennes dans les carbures sont tracées en utilisant les équations (V.1) et (V.2) ; elles sont comparées avec celles obtenues par les simulations aux éléments finis (figure V-8). Le lissage est correct, en particulier aux fortes valeurs de contraintes. Or, par la suite, nous nous intéresserons à la fraction de carbures rompus (ou décollés), donc à la fraction de carbure dans lesquels la contrainte de traction est supérieure à la contrainte de rupture du carbure.

Les paramètres σ_{0H} et α_H peuvent être exprimés en fonction de la température absolue en utilisant une expression exponentielle avec 3 paramètres :

$$\sigma_{0H}(T) = A_1 - B_1 \exp\left(-\frac{C_1}{T}\right) \qquad \text{(V.3)}$$

$$\alpha_H(T) = A_2 - B_2 \exp\left(-\frac{C_2}{T}\right) \qquad \text{(V.4)}$$

Sur la figure V-9, les lois $\sigma_{0H}(T)$ et $\alpha_H(T)$ sont comparées aux paramètres identifiés aux différentes températures. Les lois $\sigma_{0H}(T)$ et $\alpha_H(T)$ montrent un bon accord avec les valeurs de σ_{0H} et α_H identifiées aux différentes températures.

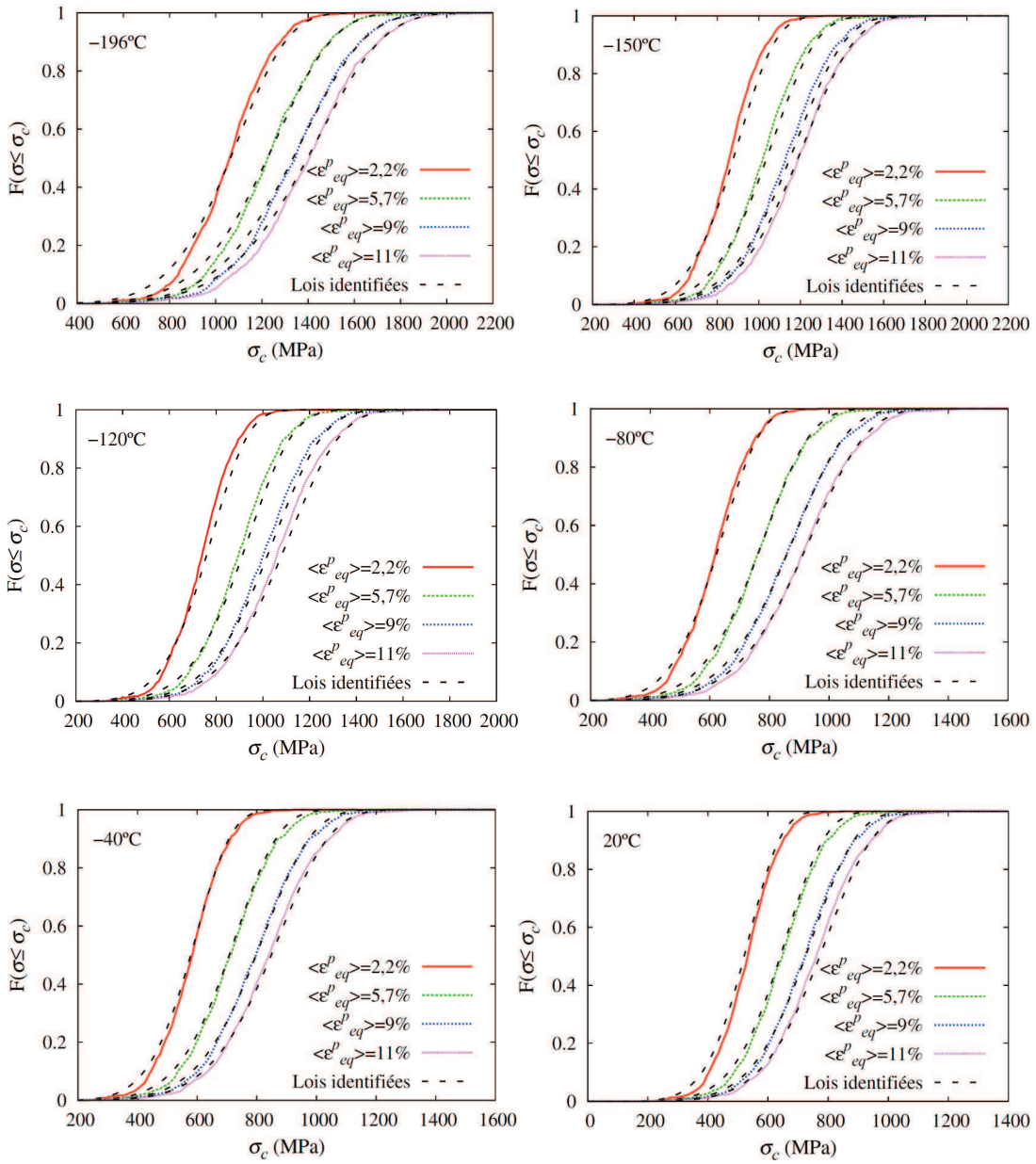


figure V-8 : Comparaison des distributions des contraintes moyennes dans les carbures avec les lois identifiées

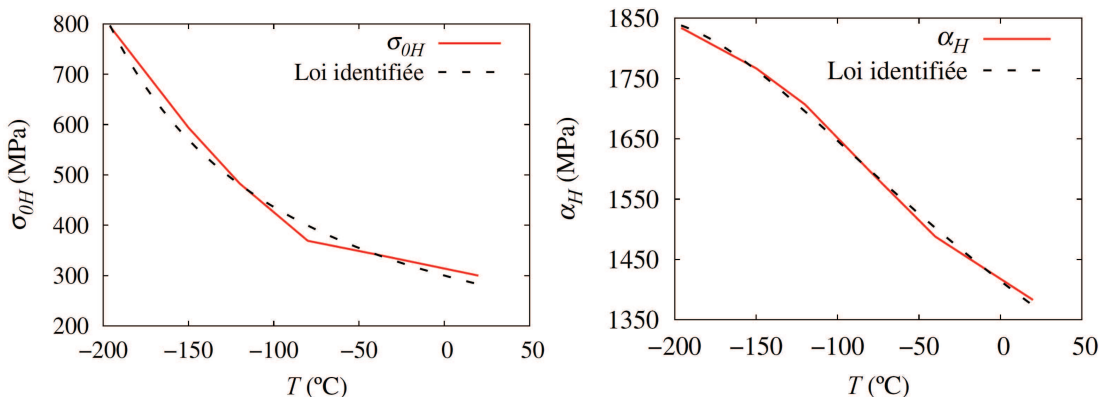


figure V-9 : Comparaison de la loi identifiée pour σ_{0H} et α_H avec ceux obtenus température par température

Au final, la contrainte critique sera un paramètre et on appellera $F_{\sigma_c}\left(<\varepsilon_{eq}^p>,T\right)$, la fraction de carbures subissant une contrainte de traction inférieure ou égale à σ_c :

$$F_{\sigma_c}\left(<\varepsilon_{eq}^p>,T\right)=1-\exp\left(-\left(\frac{\sigma_c}{\sigma_u\left(<\varepsilon_{eq}^p>,T\right)}\right)^m\right) \qquad \text{(V.5)}$$

V.3 PROBABILITE ELEMENTAIRE DE MICROFISSURATION

V.3.1 Distribution spatiale des carbures

La distribution des contraintes moyennes de traction dans les carbures a été représentée en utilisant une fonction de type Weibull. Cette fonction définit la fraction en nombre de carbures soumis à une contrainte inférieure ou égale à une contrainte critique, σ_c. La distribution évolue avec la déformation plastique équivalente moyenne et avec la température.

La probabilité de rupture par clivage d'un volume élémentaire V_0, dépendra de la probabilité de trouver des microfissures dans ce volume élémentaire. On fait l'hypothèse que les microfissures sont issues de la rupture des carbures. Cette hypothèse n'est pas infirmée par les observations fractographiques même s'il n'a pas été possible d'identifier la nature des sites. Ainsi, la probabilité de trouver n microfissures dans un volume élémentaire est égale à la probabilité de trouver n carbures dont la contrainte de traction dépasse la contrainte de rupture des carbures ou de décohésion), σ_c, et que l'on dénommera par la suite « carbures rompus ».

Nous connaissons la fraction de carbures rompus pour une déformation macroscopique fixée (et une hypothèse de déformations planes) à une température donnée. Pour déterminer la probabilité d'avoir n carbures rompus dans un volume élémentaire, il faut faire l'hypothèse d'une répartition spatiale. On considèrera que la répartition spatiale des carbures est uniforme et que la position d'un carbure est indépendante de celle des carbures voisins. La distribution de Poisson est alors employée pour représenter la répartition spatiale des carbures. C'est l'hypothèse également utilisée dans les modèles de rupture écrits à l'aide de la distribution de Weibull, en particulier le modèle de Beremin. Cette hypothèse n'a pas été utilisée pour la génération de la microstructure, car le nombre de carbures a été imposé pour un volume fixé. Néanmoins, pour une distribution de Poisson avec une valeur moyenne de 100, la probabilité que le nombre de points (carbures) se situe entre 80 et 120 est de 96%. Le choix de fixer le nombre de carbures n'est donc pas critique.

En utilisant une distribution de Poisson, la probabilité de trouver n carbures dans un volume V contenant en moyenne $n_V V$ carbures s'écrit comme suit :

$$P\left(n \text{ dans } V\right)=P_n=\frac{\left(n_V V\right)^n}{n!}\exp\left(-n_V V\right) \qquad \text{(V.6)}$$

et $$P\left(0 \text{ dans } V\right)=P_0=\exp\left(-n_V V\right)$$

avec n_V la densité volumique moyenne de carbure rompus : c'est le nombre des carbures soumis à une contrainte supérieure ou égale à une contrainte critique par unité de volume. L'équation (V.1) exprime la fraction en nombre des carbures soumis à une contrainte inférieure à une

contrainte critique, par rapport au nombre total des carbures. En utilisant cette équation, la densité volumique moyenne est donc :

$$n_V\left(\sigma_{22} \geq \sigma_c\right) = \frac{N_t}{V_0}\left(1 - F_{\sigma_c}\left(<\varepsilon_{eq}^p>, T\right)\right) = \frac{N_t}{V_0}\exp\left(-\left(\frac{\sigma_c}{\sigma_u(<\varepsilon_{eq}^p>, T)}\right)^m\right) \qquad \text{(V.7)}$$

où N_t est le nombre moyen de carbures (100) dans V_0, le volume contenant les carbures (le volume de l'agrégat). Comme la rupture est un phénomène irréversible, la densité volumique moyenne de carbures rompus ne peut décroître au cours du temps. Ainsi, on écrit plutôt :

$$n_V(t) = \max_{0 \leq \tau \leq t} \frac{N_t}{V_0}\exp\left(-\left(\frac{\sigma_c}{\sigma_u(<\varepsilon_{eq}^p(\tau)>, T)}\right)^m\right) \qquad \text{(V.8)}$$

Cette expression ne peut pas s'appliquer au cas d'un chargement à température variable. Nous allons étudier la probabilité d'avoir au moins 1 carbure rompu dans un volume V_0, c'est-à-dire la probabilité élémentaire de microfissuration. Elle s'écrit :

$$P_{R0}(t) = 1 - P_0 = 1 - \exp\left(-V_0 \cdot n_V(t)\right) \qquad \text{(V.9)}$$

L'évolution de cette probabilité est présentée sur la figure V-10 en fonction de la déformation plastique équivalente moyenne et de la température pour une contrainte critique fixée. Comme prévu, la probabilité augmente avec l'augmentation de la déformation plastique équivalente moyenne, car les carbures sont de plus en plus chargés, et elle diminue lorsque la température augmente, car la contrainte d'écoulement de la matrice est de plus en plus faible. On note que l'influence de la température est majeure sur la gamme des valeurs étudiées.

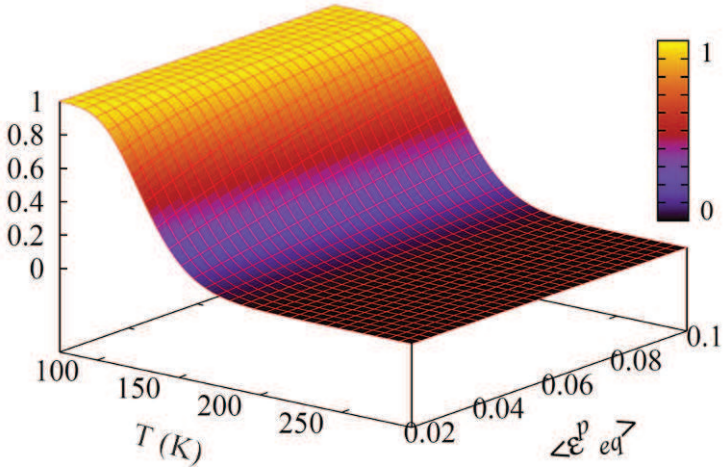


figure V-10 : Probabilité élémentaire de microfissuration en fonction de la déformation globale et de la température (σ_c=1700MPa)

La probabilité élémentaire de micro-fissuration P_{R0} est présentée sur la figure V-11 en fonction de la déformation globale à différentes températures pour une contrainte critique σ_c de 1700MPa. En utilisant cette contrainte critique, les valeurs de probabilité varient entre 0 et 1 pour les différentes températures étudiées et les niveaux de déformation entre 0.02 et 0.1. A basse température, la probabilité de microfissuration évolue très rapidement avec la déformation. Ceci

s'explique par la faible dispersion des contraintes aux basses températures, ainsi que par les fortes valeurs des contraintes qui permettent d'atteindre la contrainte critique σ_c, sans grande déformation préalable. Pour les températures plus élevées, la variation est moins brutale. En utilisant la valeur 1700MPa pour la contrainte critique σ_c, la probabilité élémentaire de microfissuration est nulle jusqu'à une déformation plastique équivalente moyenne de 20% pour les températures supérieures à -40°C.

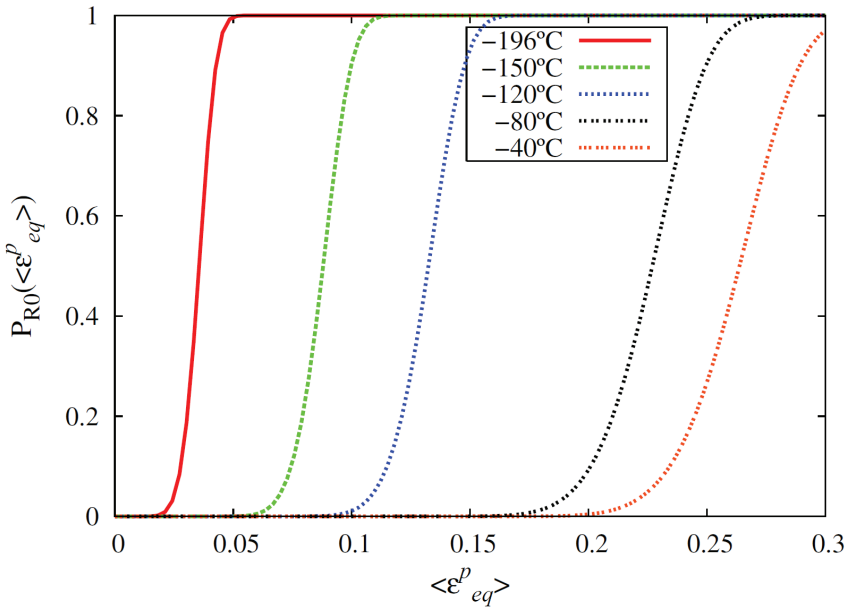


figure V-11 : Probabilité élémentaire de microfissuration P_{R0} en fonction de la déformation (σ_c=1700MPa)

V.3.2 Influence de la contrainte critique

Si on s'intéresse à la probabilité de microfissuration dans un grand volume V, comme par exemple en avant du front d'une fissure, les niveaux de probabilité élémentaire intéressants seront très inférieurs à 1. En effet, si on discrétise le front de fissure avec N maillons élémentaires, la probabilité de microfissuration en avant du front vaut :

$$P_R = 1 - \left(1 - P_{R0}\right)^N \tag{V.10}$$

La probabilité élémentaire peut s'écrire en fonction de la probabilité de l'éprouvette :

$$P_{R0} = 1 - \left(1 - P_R\right)^{1/N} \tag{V.11}$$

En considérant par exemple la taille de volume V de l'ordre $(500\mu m)^3$ et la taille de l'agrégat utilisé dans ce travail, N=1600 volumes élémentaires peuvent se trouver dans ce volume. En utilisant l'équation (V.11), on peut relier une probabilité de microfissuration de l'éprouvette de 0,99 à une probabilité de microfissuration élémentaire de 3×10^{-3}. Afin d'étudier l'influence de la contrainte critique σ_c sur la probabilité élémentaire, on va s'intéresser aux valeurs inférieures à 10^{-2}. Elles sont tracées sur la figure V-12 pour différentes températures. Pour une contrainte critique σ_c élevée, il faut des déformations d'autant plus importantes que la contrainte critique est élevée. On note qu'au-delà d'une valeur de contrainte critique, la probabilité de rupture élémentaire de microfissuration reste nulle pour des déformations équivalentes moyennes

inférieures à 10% lorsque la température est élevée. Par exemple, pour des valeurs de σ_c supérieures à 1700MPa, la probabilité de rupture est nulle aux températures supérieures à -80°C avant 10% de déformation. Cette étude est un guide pour le choix de la valeur de la contrainte critique qui est le seul paramètre ajustable de cette distribution de rupture.

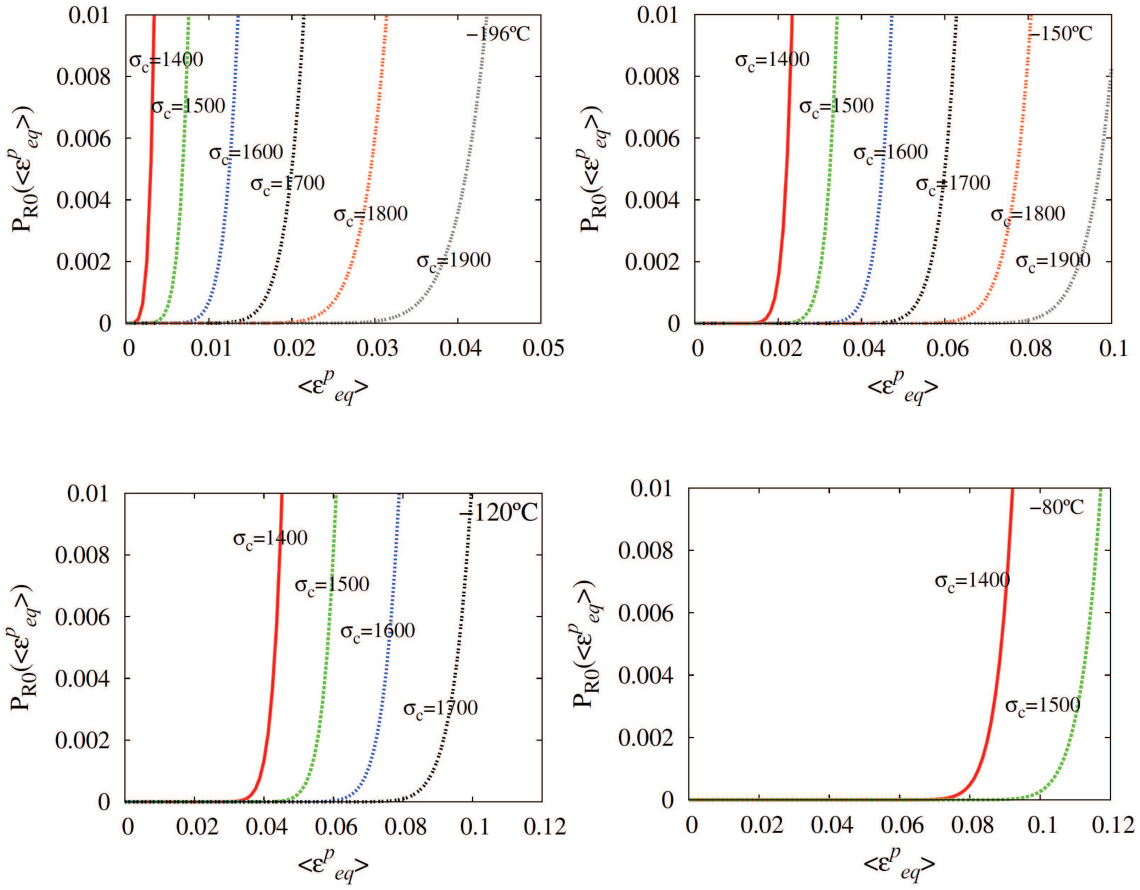


figure V-12 : Évolution de la probabilité élémentaire P_{R0} de microfissuration pour différentes valeurs de contrainte critique σ_c, aux températures -196, -150, -120 et -80°C

V.4 PROBABILITE DE RUPTURE PILOTEE PAR LA GERMINATION

V.4.1 Démarche

L'objectif est de rendre compte de l'évolution rapide de la ténacité avec la température dans le bas de transition ductile-fragile des aciers et d'étudier diverses hypothèses concernant les étapes critiques de la rupture par clivage. Pour ce faire, nous nous appuyons sur les résultats que nous avons obtenus sur l'acier E35 sphéroïdisé. Le nombre de résultats expérimentaux étant faible, ces résultats constitueront essentiellement un guide. Par ailleurs, la caractérisation de ce matériau ne permet pas de déterminer un modèle de déchirure ductile. Cependant, les résultats de la littérature (Haušild, 2002, Tanguy et al., 2005) donnent des indications sur l'influence de la prise en compte de la déchirure ductile sur la prédiction de la rupture fragile.

Nous allons ainsi définir des modèles de rupture qui seront appliqués en post-traitement des calculs par éléments finis de l'éprouvette SENT présentés au chapitre III. Ces modèles sont tous basés sur les hypothèses suivantes :

1- l'hypothèse du maillon le plus faible,

2- une répartition spatiale uniforme des défauts,

3- la rupture a lieu dans le volume plastifié à l'échelle macroscopique, (critère de déformation plastique minimum $\varepsilon^{p}_{eq\ min}=10^{-4}$)

4- la microfissuration est issue de la rupture des carbures,

5- la résistance des carbures est unique et indépendante de la température.

V.4.2 Prédiction de la ténacité

La probabilité élémentaire obtenue dans le paragraphe précédent peut être appliqué sur une éprouvette SENT. Chaque élément dans l'éprouvette apporte sa contribution dans la probabilité de rupture en fonction de son volume et de sa déformation. On peut écrire la probabilité de rupture de l'éprouvette au cours de l'essai comme :

$$P_R(t) = 1 - \exp\left[-\int_{V_p} \underset{0\le\tau\le t}{\mathrm{Max}} \left(\exp\left(-\left(\frac{\sigma_c}{\sigma_u(<\varepsilon_p^{eq}>,T)} \right)^m \right) \right) \frac{N_t}{V_0} dV \right] \qquad \text{(V.12)}$$

où σ_c est la contrainte critique de rupture d'un carbure, $<\varepsilon_p^{eq}>$ est la déformation plastique équivalente moyenne subie par le volume élémentaire, T est la température absolue, N_t/V_0 est le nombre moyen des carbures dans un volume élémentaire, m est le paramètre de forme, σ_u est le paramètre d'échelle, pour la distribution de Weibull, et V_p est le volume plastifié.

Il faut rappeler que la contrainte σ_c est un paramètre du modèle qui est lié à la résistance des carbures et doit être ajusté sur les résultats des essais de ténacité. Pour cela plusieurs calculs de probabilité sont effectués à la température de -196°C en utilisant différentes valeurs de σ_c (1500, 1600, 1700 et 1800 MPa). Les courbes de probabilité obtenues avec ces valeurs de la contrainte critique sont comparées sur la figure V-13. Plus la contrainte critique est élevée, plus la ténacité est élevée. On note que la ténacité augmente plus vite pour les valeurs plus élevées de la contrainte critique : l'écart entre la probabilité de rupture pour les contraintes critique de 1500 et 1600 MPa est moins important que celui entre 1700 et 1800MPa. La dispersion de la ténacité est d'autant plus importante que la contrainte critique est élevée.

Les valeurs de la ténacité J_c à 1%, 50% et 99% de probabilité de rupture de l'éprouvette, sont tracées pour des différentes valeurs de la contrainte critique. Ces valeurs sont comparées aux résultats expérimentaux : la valeur de la contrainte critique qui convient le mieux est de 1700 MPa (figure V-14).

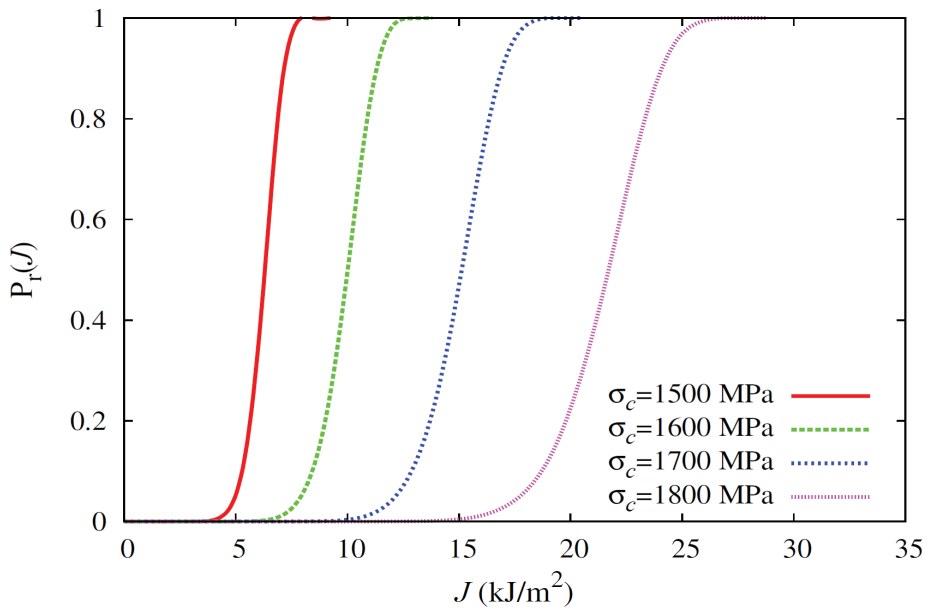


figure V-13 : Distribution de ténacité pour différentes valeurs de contrainte critique du carbure

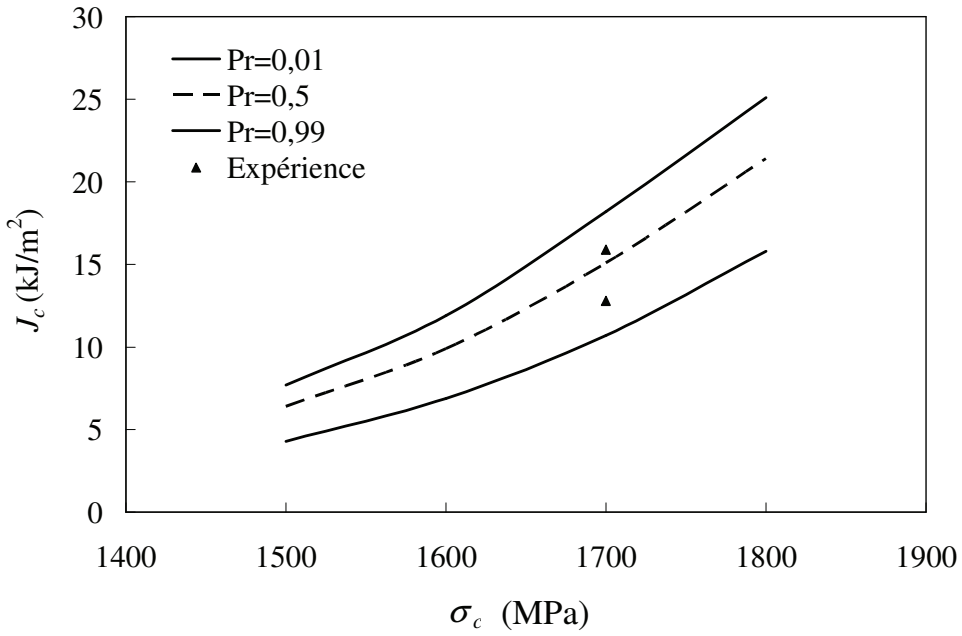


figure V-14. Evolution de la ténacité à-196°C en fonction de la contrainte critique du carbure pour 1%, 50% et 99% de la probabilité de rupture

On utilise la contrainte critique des carbures identifiée à la température de -196°C pour calculer la probabilité de rupture aux températures de -150 et -120°C. Il faut noter que les paramètres utilisés dans l'équation de σ_u varient avec la température, mais cette variation a été identifiée sur les calculs de microstructure. La figure V-15 montre l'évolution des valeurs de ténacité pour les probabilités de rupture de 1%, 50% et 99% obtenues aux températures de -196, -150 et -120°C en comparaison avec des valeurs de ténacité à la rupture obtenues par les essais de ténacité.

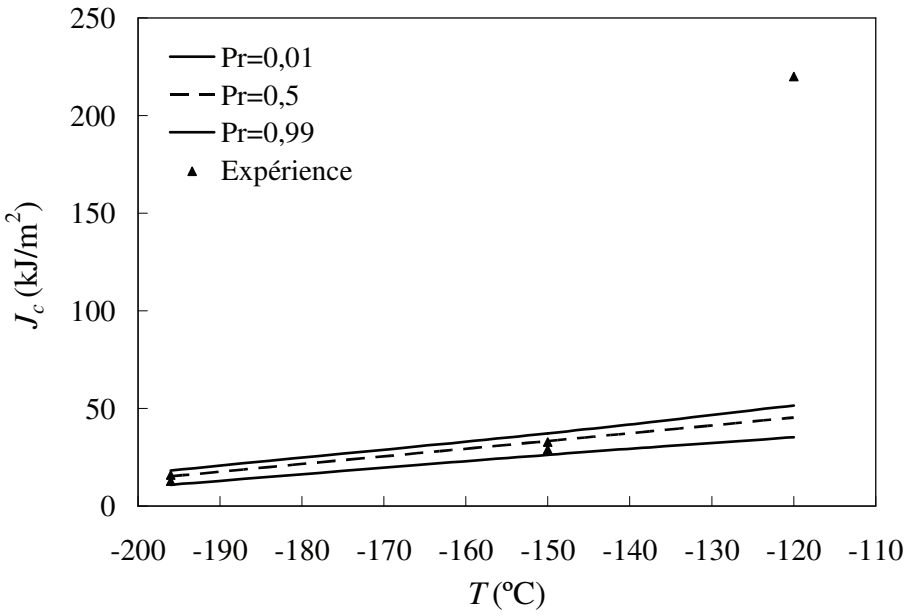


figure V-15. Evolution de la ténacité pour les probabilités de rupture de 1%, 50% et 99% aux températures de -196, -150 et -120°C avec les valeurs expérimentales

La prédiction de la ténacité à la température de -150°C est en bon accord avec les résultats expérimentaux. Par contre, les résultats de la prédiction de la ténacité à -120°C sous-estime les valeurs expérimentales et la dispersion de la ténacité. Cela signifie qu'en utilisant un critère de rupture basé seulement sur la germination, la prédiction de la rupture aux températures plus élevées ne donne pas des résultats cohérents avec ceux obtenus par les essais expérimentaux. On peut ainsi conclure que la germination de la microfissure n'est pas l'étape déterminante pour la rupture finale par clivage à -120°C. Les résultats sont cohérents avec la position des sites de clivage relevés au chapitre III.

V.5 PROBABILITE DE RUPTURE PILOTEE PAR LA PROPAGATION

V.5.1 Critère de Griffith

Afin de mieux prédire la ténacité aux températures plus élevées (-150 et -120°C), on propose d'ajouter un critère de propagation pour les microfissures issues des carbures rompus : des microfissures apparaissent dans le matériau au fur et à mesure du chargement, mais c'est la propagation d'une de ces microfissures qui provoque la rupture finale par clivage. On utilise le critère de Griffith pour une microfissure de type « penny shaped ». Dans le modèle précédent, on supposait ce critère implicitement satisfait. La contrainte macroscopique locale qui est normale à la macrofissure doit atteindre la valeur nécessaire pour l'extension d'une telle microfissure :

$$\sigma_G = \sqrt{\frac{\pi E \gamma_p(T)}{2(1-\nu^2) r_c}} \qquad \text{(V.13)}$$

où E est le module de Young, ν le coefficient de Poisson, γ_p l'énergie équivalente de surface, et r_c la taille critique de la microfissure (diamètre des carbures). Cette taille est prise égale à 2µm, qui est la valeur maximale de la distribution de diamètre des carbures aux joints de grains.

L'énergie équivalente de surface varie en fonction de la température. Wallin et al. (1984) propose de décrire l'énergie équivalente pour la propagation dans la ferrite en deux termes :

$$\gamma_p(T)=\gamma_s+w_p(T) \qquad \text{(V.14)}$$

où γ_s est l'énergie de décohésion surfacique indépendante de la température et w_p est le travail plastique qui accompagne la propagation de la fissure. Wallin et al. (1984) prennent une valeur de 2,15 Jm^{-2} pour γ_s. Ils proposent une fonction exponentielle pour w_p comme :

$$\gamma_p(T)=2{,}15+1{,}77e^{0.0104T} \qquad \text{(V.15)}$$

où T est la température absolue. La figure V-16 montre l'évolution de l'énergie de surface en fonction de la température proposée par Wallin et al. (1984).

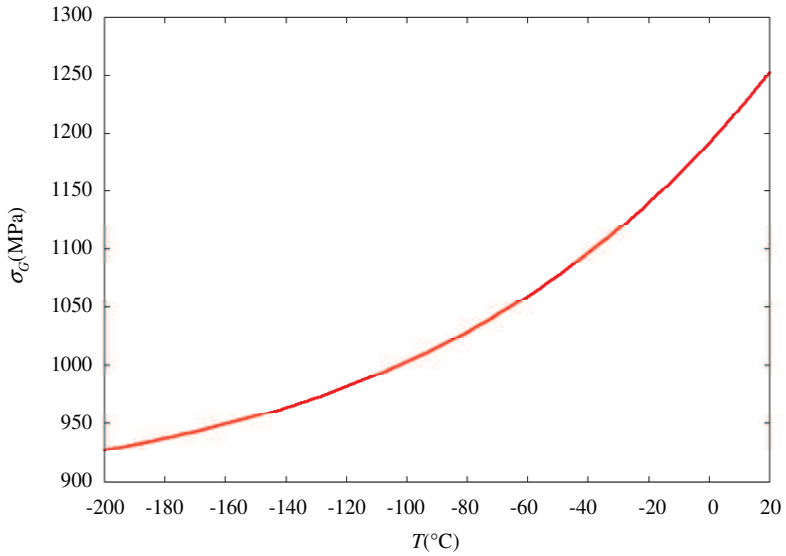


figure V-16. Evolution de la contrainte de Griffith en fonction de la température pour une taille de carbure r=1 µm et l'évolution de l'énergie de décohésion surfacique proposée par Wallin et al.(1984)

Les valeurs de γ_p sont obtenues à l'aide de la loi proposée par Wallin et al. (1984). Ces valeurs sont égales à 6, 8,5 et 11 J/m^2 aux températures de -196, -150 et -120°C respectivement.

Afin d'appliquer le critère de Griffith sur les éprouvettes SENT, on utilisera les contraintes principales maximales pour comparer à la contrainte de Griffth. Nous avons calculé les distributions de carbures rompus en comparant la contrainte de traction dans la direction de traction macroscopique. On suppose donc que les microfissures seront perpendiculaires à la direction de plus grande traction, c'est-à-dire la contrainte principale maximale. Les contraintes principales maximales sont calculées pour chaque élément du modèle éléments finis. Si le niveau de cette contrainte dans un élément dépasse la contrainte de Griffith obtenue par l'équation (V.13), cet élément peut contribuer à la probabilité de rupture relative à la fraction de carbures rompues. Cette contribution est prise en compte par le nombre des carbures qui peuvent participer à la rupture, n_V :

$$\begin{cases} n_V{}^{\tau} = \dfrac{N_t}{V_0}\left(1-F\left(<\varepsilon_{eq}^{p}>,T\right)\right) & \text{si } \sigma_1 \geq \sigma_G \\ n_V{}^{\tau} = 0 & \text{si } \sigma_1 < \sigma_G \end{cases} \qquad \text{(V.16)}$$

où N_t/V_0 est le nombre des carbures dans un volume élémentaire et F est la fraction cumulée du nombres de carbures qui sont soumis à une contrainte inférieure à σ_c.

La figure V-17 montre les courbes de la probabilité de rupture obtenues à -196, -150 et -120°C en utilisant les valeurs de γ_p obtenues par l'équation de Wallin et al.(1984). La probabilité de rupture à la température de -196°C ne montre pas de variation importante par rapport à celle obtenue par le critère de germination. Ceci est lié à la faible valeur de l'énergie équivalente de surface et aux fortes valeurs de contrainte principale maximale dues à la haute limite d'élasticité : la rupture est pilotée par la germination des microfissures. La probabilité de rupture à la température de -150°C est surestimée par rapport aux résultats expérimentaux. En prenant des valeurs moins importantes de l'énergie équivalente de surface, des valeurs plus faibles de la probabilité de rupture peuvent être obtenues. Cela est discuté dans le paragraphe suivant. Les valeurs de ténacité obtenues sont du bon ordre de grandeur, la variation de la ténacité avec la température est rapide comme attendu.

Cependant, on note une dispersion quasi-nulle à -120°C. Cela est liée à la façon d'appliquer le critère de Griffith : la probabilité de rupture dans les éléments qui subissent une contrainte inférieure à la contrainte Griffith est nulle ; en revanche une fois que le critère de Griffith est satisfait dans cet élément, cet élément peut contribuer à la probabilité de rupture. Or, cela nécessite un certain niveau de chargement qui se produit avec un niveau élevé de la déformation et correspond donc à une probabilité de microfissuration qui vaut 1.

Le critère de germination des microclivages serait donc prépondérant à basse température, tandis que c'est le critère de propagation qui explique l'augmentation de la ténacité avec la température.

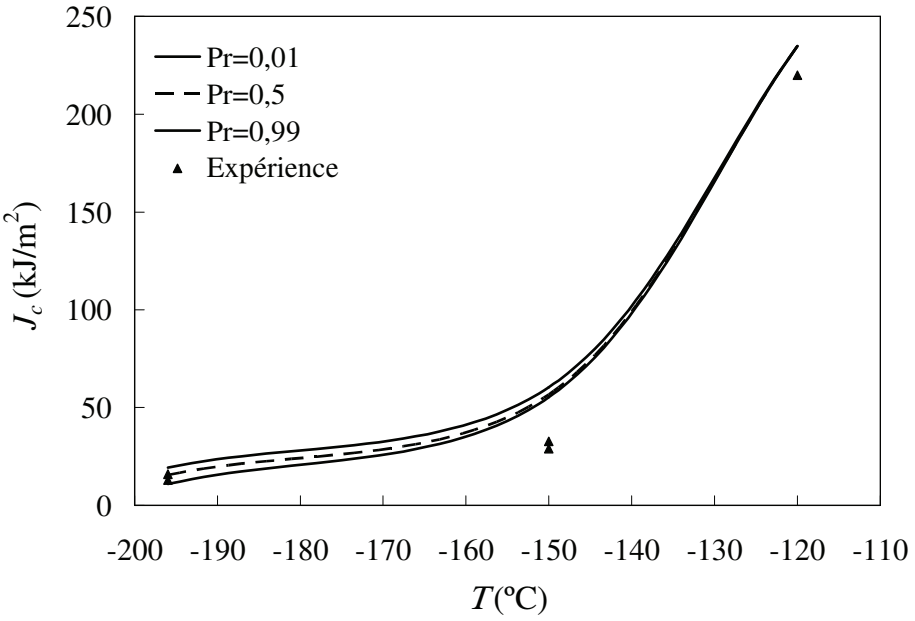


figure V-17 : Comparaison des valeurs de ténacité pour les probabilités de rupture de 1%, 50% et 99% aux températures de -196, -150 et -120°C, avec les valeurs expérimentales. Critère déterministe en propagation

V.5.2 Influence de la distribution de taille des carbures

Un critère déterministe en propagation ne permet pas de reproduire la dispersion de ténacité que l'on peut observer lorsque la température augmente. On propose donc de faire intervenir la distribution de taille des défauts critiques (carbures) dans l'équation de Griffith. Les carbures de grand diamètre sont à l'origine des microfissures plus longues. Ces microfissures vont nécessiter un plus faible niveau de contrainte de Griffith pour leur propagation. Les microfissures issues des carbures trop petits ne se propageront jamais, car la contrainte nécessaire ne sera jamais atteinte dans l'éprouvette. Ainsi, seuls les carbures comportant des fissures qui sont susceptibles de se propager, peuvent contribuer à la probabilité de rupture. La densité volumique de défauts est donc la fraction de carbures rompus qui satisfait le critère de Griffith :

$$n_V{}^{\tau} = \frac{N_G(\sigma_1)}{V_0}\left(1 - F_{\sigma_c}\left(<\varepsilon_{eq}^p>, T\right)\right) \qquad \text{(V.17)}$$

où $N_G(\sigma_{1.})$ est le nombre moyen de carbures soumis à une contrainte principale maximale suffisante pour l'extension de microfissures. Pour définir cette fonction, on utilise la distribution cumulée des tailles des carbures supérieurs à une taille (rayon) critique (r_c) identifié dans le chapitre

$$F_C(r \geq r_c) = \alpha r_c^{-\beta} \qquad \text{(V.18)}$$

où α et β sont les paramètres identifiés sur la distribution cumulée obtenue par les observations microscopiques. Leurs valeurs sont égales à 0.1µm$^{\beta}$ et 7.3 respectivement. Par ailleurs, on peut exprimer la taille critique de défaut (carbure) en fonction de la contrainte principale maximale à l'aide de l'équation de Griffith. Cette distribution cumulée s'écrit en fonction de la contrainte principale maximale à l'aide de l'équation (V.13) :

$$F_G(\sigma_1) = \left(\frac{\sigma_1}{\sigma_u^*(T)}\right)^{2\beta} \qquad \text{(V.19)}$$

$$\sigma_u^*(T) = \left(\alpha^{-1/(2\beta)}\right).\left(\frac{E\pi\gamma_p(T)}{2(1-\nu^2)}\right)^{1/2} \qquad \text{(V.20)}$$

où $\sigma^*_u(T)$ est un coefficient qui dépend des propriétés du matériau qui elles-mêmes sont fonctions de la température. Le nombre moyen des microfissures susceptibles de s'étendre (N_G) est alors :

$$N_G\left(\sigma_1\right) = F_G\left(\sigma_1\right) N_t \qquad \text{(V.21)}$$

Ainsi, en tenant compte de la fraction moyenne de carbure rompus, la densité volumique moyenne des fissures satisfaisant le critère de Griffith au temps τ, s'écrit :

$$n_V{}^{\tau} = \frac{\left(\sigma_1^{\tau}/\sigma_u^*(T)\right)^{2\beta} N_t}{V_0}\left(1 - F_{\sigma_c}\left(<\varepsilon_{eq}^p>, T\right)\right) \qquad \text{(V.22)}$$

La figure V-18 montre la fraction des microfissures qui satisfont le critère de Griffith, en fonction de la contrainte principale maximale pour différentes valeurs de γ_p : pour un niveau fixe de contrainte principale maximale, le nombre des carbures qui participent à la rupture diminue

lorsque l'énergie surfacique γ_p augmente. Cette fraction devient nulle pour les niveaux de contraintes inférieures à 1000MPa quelle que soit la valeur de γ_p considérée dans ce travail.

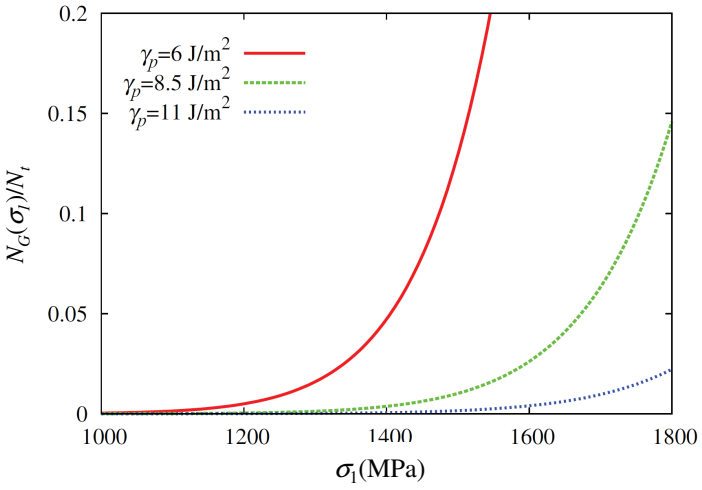


figure V-18. Evolution de la fraction des microfissures susceptibles de se propager en fonction de la contrainte de traction pour différentes valeurs de l'énergie surfacique

Dans un premier temps, la probabilité de rupture de l'éprouvette SENT est calculée à la température de -196°C avec la contrainte critique σ_c de 1700 MPa. L'énergie équivalente de surface γ_p est de 6 J/m^2. Ce résultat surestime la ténacité et une identification du paramètre de σ_c semble nécessaire. La probabilité de rupture de l'éprouvette est calculée pour les contraintes critiques σ_c de 1600 et 1500 MPa et les courbes d'isoprobabilité de rupture sont tracées en fonction de σ_c pour les probabilités de rupture de 1, 50 et 99% et comparées avec les résultats expérimentaux (figure V-19). Les valeurs de la ténacité obtenues par les essais expérimentaux se situent entre 1 et 99% de la probabilité de rupture pour les contraintes critiques de 1500 et 1600MPa. On peut choisir les deux valeurs de la contrainte critique pour calculer la probabilité de rupture aux températures plus élevées.

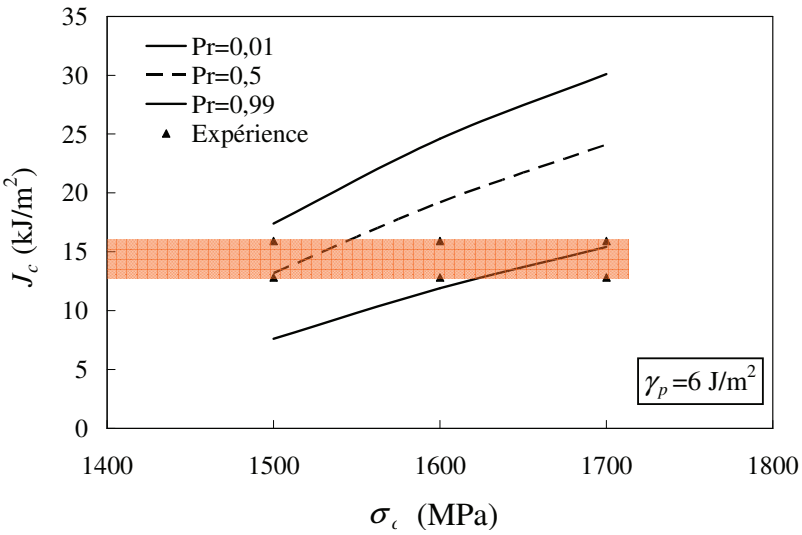


figure V-19 : Evolution de la ténacité en fonction de la contrainte critique du carbure pour 1%, 50% et 99% de la probabilité de rupture de l'éprouvette à température de -196°C, (valeur de γ_p est fixées à 6 J/m^2)

Les distributions de ténacité sont calculées aux températures de -150 et -120°C en utilisant la contrainte critique de 1600MPa. L'énergie équivalente de surface est toujours de 8.5 et 11J/m^2 aux températures de -150 et -120°C respectivement selon l'équation (V.15). La figure V-20 montre l'évolution de la ténacité en fonction de la température.

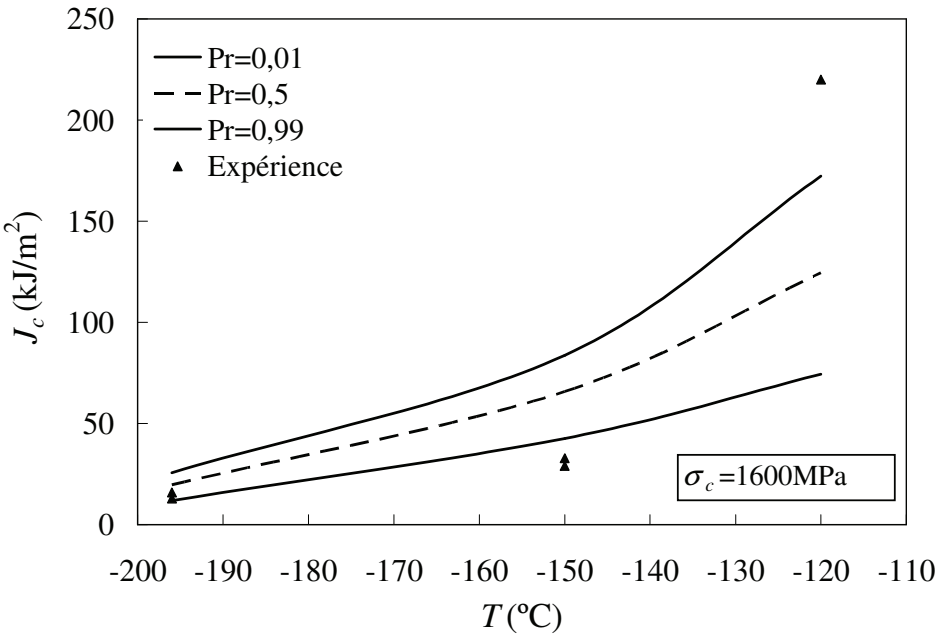


figure V-20 : Evolution des valeurs de ténacité, pour les probabilités de rupture de 1%, 50% et 99% aux températures de -196, -150 et -120°C (critère en propagation en considérant la distribution de taille des carbures avec la contrainte critique de germination de 1600MPa) ; comparaison avec les valeurs expérimentales

La probabilité de rupture est calculée avec la contrainte critique de 1500MPa. L'évolution de la ténacité à la rupture pour les probabilités de 1, 50 et 99% est tracée sur la figure V-21. Les ténacités à la température de -150°C sont toujours surestimées, mais elles sont plus proches des valeurs expérimentales que celles obtenues avec la contrainte critique de 1600MPa. On note que la borne basse de la ténacité n'évolue pas beaucoup lorsque la température augmente.

Les résultats montrent que la dispersion de la ténacité aux températures de -150°C et -120°C provient en partie du critère de propagation. Cette dispersion dépend de la distribution de tailles des carbures et de l'énergie équivalente de surface γ_p. La valeur de la contrainte critique qui intervient dans le critère de germination, décale les courbes de la probabilité et ne joue pas sur la dispersion de la ténacité.

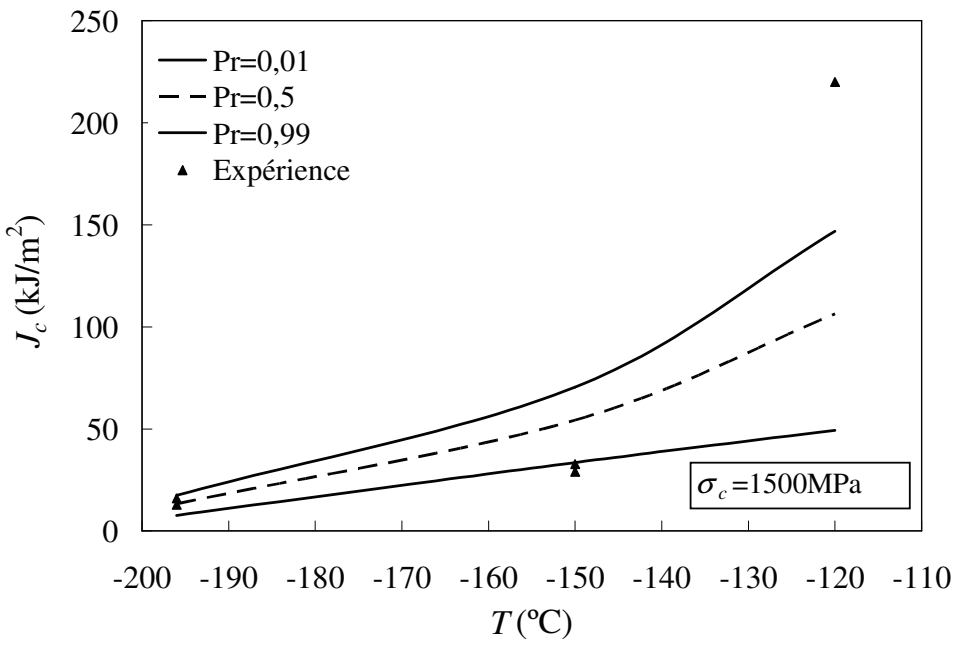


figure V-21 : Evolution avec la température des valeurs de ténacité pour les probabilités de rupture de 1%, 50% et 99% aux températures de -196, -150 et -120°C (contrainte critique de germination de 1500MPa-critère en propagation en considérant la distribution de taille des carbures) ; comparaison avec les valeurs expérimentales

On peut supposer qu'il existe une taille maximale de carbure. Cette hypothèse est prise en compte par une contrainte principale maximale minimale pour l'extension des microfissures. La distribution cumulée des tailles des carbures est modifiée en introduisant une taille maximale de r_{max} :

$$F_C(r \geq r_c) = \alpha(r_c^{-\beta} - r_{max}^{-\beta}) \qquad \text{(V.23)}$$

Afin de choisir la taille maximale des carbures, la fonction identifiée précédemment sur la distribution cumulée des tailles de carbures est tracée pour les tailles entre 1.1 et 2.2 µm. A partir de 2 µm, la distribution cumulée des tailles des carbures tend vers zéro (voir chapitre II). On choisit une taille seuil des carbures r_{max}= 2 µm. La fonction de distribution cumulée des tailles de carbures est identifiée en prenant en compte la taille maximale des carbures. Les valeurs des paramètres α et β sont quasiment identiques aux valeurs obtenues sans limite sur la taille des carbures. Cela est lié au faible niveau de la contribution de la taille maximale ($\alpha\, r_{max}^{-\beta}$). La valeur de cette contribution en prenant la taille maximale de 2 µm est de 0,00069.

La nouvelle fonction de la distribution cumulée des tailles de microfissures critiques peut être écrite en fonction de la contrainte principale maximale à l'aide de l'expression de Griffith :

$$F_G(\sigma_1) = \left(\frac{\sigma_1}{\sigma_u^*(T)}\right)^{2\beta} - \left(\frac{\sigma_{th}(T)}{\sigma_u^*(T)}\right)^{2\beta} \qquad \text{(V.24)}$$

où $\sigma^*_u(T)$ est le coefficient exprimé par l'équation (V.20) et $\sigma_{th}(T)$ est la contrainte seuil liée à la taille maximale de carbure :

$$\sigma_{th} = \left(\frac{\pi E \gamma_p(T)}{2(1-\nu^2) r_{max}} \right)^{1/2} \tag{V.25}$$

La figure V-22 montre l'évolution de la contrainte seuil en fonction de la température provenant de la dépendance de l'énergie de surface γ_p avec la température.

Finalement, l'équation (V.24) est modifiée comme suit :

$$F_G(\sigma_1) = \begin{cases} \left(\dfrac{\sigma_1}{\sigma_u^*(T)} \right)^{2\beta} - \left(\dfrac{\sigma_{th}(T)}{\sigma_u^*(T)} \right)^{2\beta} & \text{si } \sigma_1 > \sigma_{th} \\ 0 & \text{si } \sigma_1 \leq \sigma_{th} \end{cases} \tag{V.26}$$

La figure V-23 montre la comparaison entre les deux approches utilisées pour identifier la distribution cumulée des microfissures critiques en fonction de la contrainte principale maximale à la température de -120°C (γ_p=11 J/m^2). On peut constater que pour les valeurs importantes de la contrainte principale maximale, les deux approches donnent les mêmes fractions des microfissures critiques. Ainsi, cette contrainte seuil n'a pas de rôle sur la prédiction de la rupture à très basse température (-196°C). En revanche pour les valeurs plus faibles de la contrainte, cette différence devient plus importante. Pour les contraintes inférieures à 1400MPa (la contrainte de seuil à -120°C), cette fraction est nulle et aucune microfissure ne peut se propager après germination. On note que Haušild a utilisé une contrainte seuil constante de 1400 MPa pour la prédiction de la rupture d'un acier bainitique.

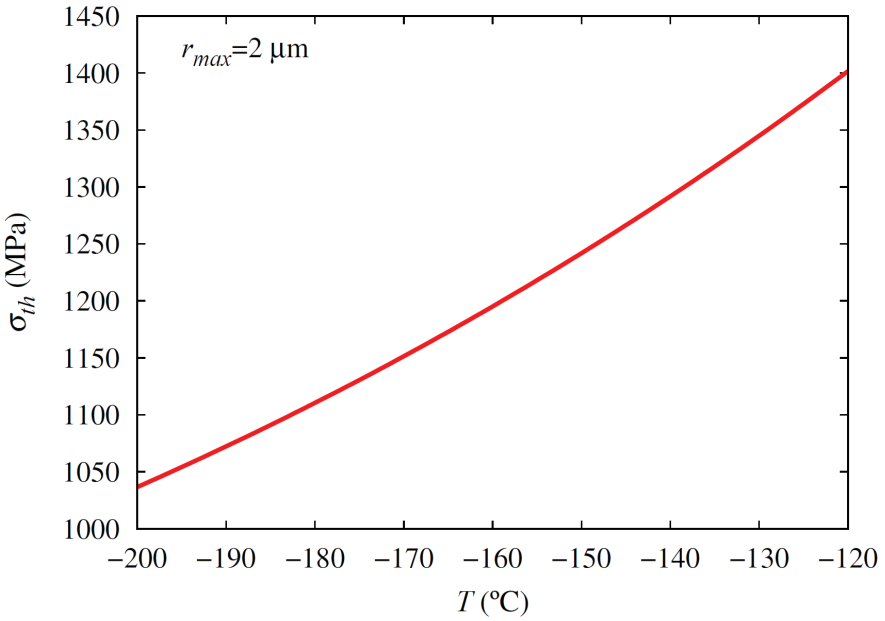


figure V-22 : Evolution de la contrainte seuil en fonction de la température en utilisant l'expression de Wallin et al . (1984) pour l'évolution de l'énergie équivalente de surface en fonction de la température et une taille maximale de défaut de 2µm

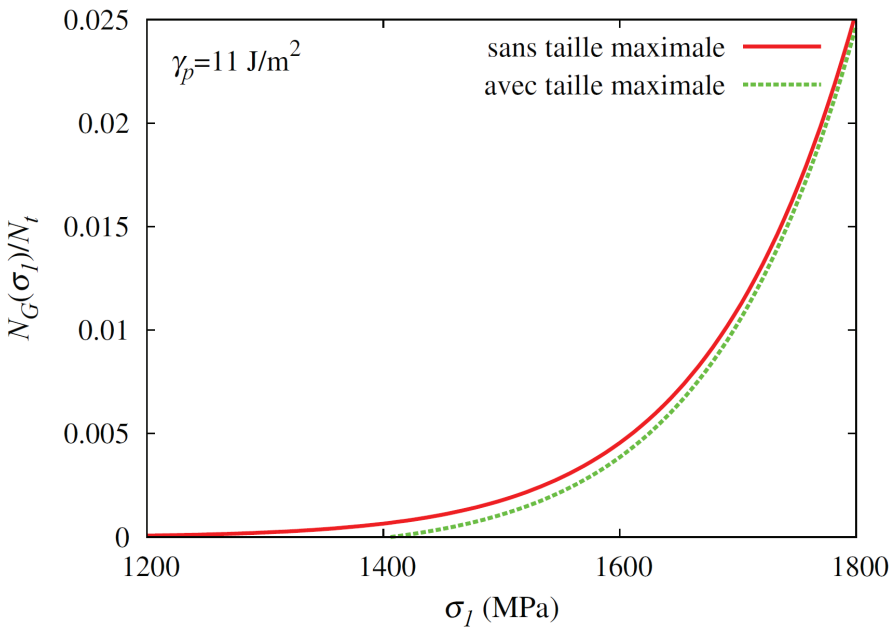


figure V-23 : Evolution de la fraction des microfissures critiques avec les deux approches : sans taille maximale de carbure et avec taille maximale de microfissure

Cette formulation qui introduit la fraction de microfissures critiques est utilisée dans les calculs de probabilité de rupture de l'éprouvette SENT aux températures de -196, -150 et -120°C. Les probabilités de rupture sont calculées avec la contrainte critique de rupture des carbures de 1500 et 1600MPa et sont présentées sur la figure V-24 et la figure V-25.

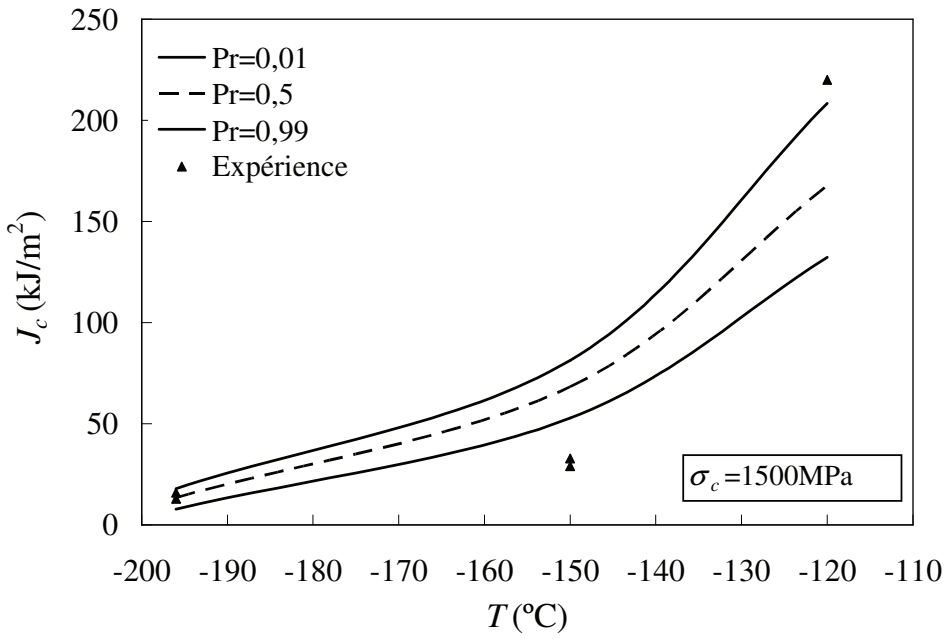


figure V-24 : Evolution de la ténacité pour les probabilités de rupture de 1%, 50% et 99% pour la contrainte critique de 1500MPa (critère en propagation en considérant la distribution de taille des carbures et une taille maximale de carbure) ; comparaison aux valeurs expérimentales

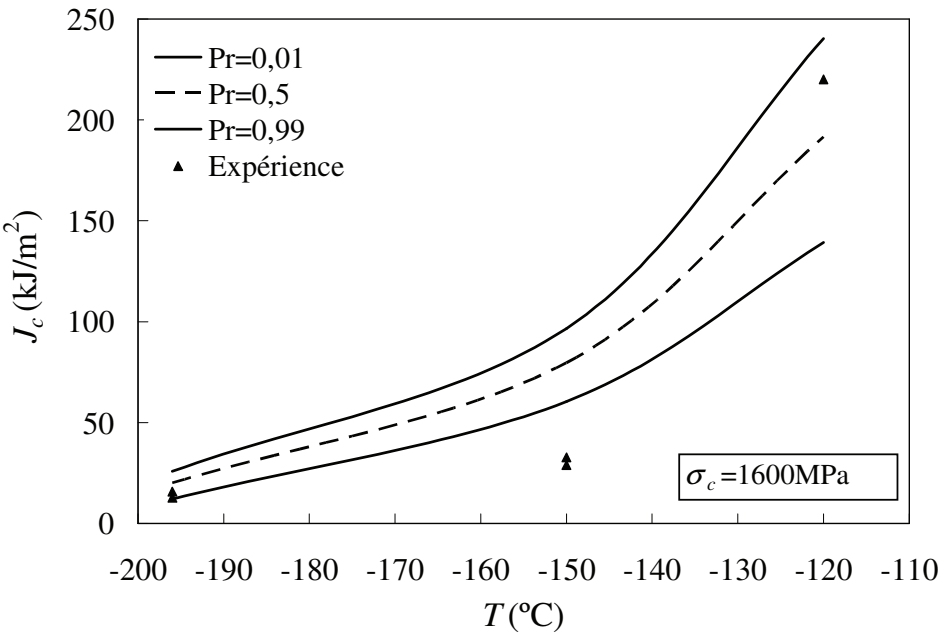


figure V-25 : Evolution de la ténacité pour les probabilités de rupture de 1%, 50% et 99% pour la contrainte critique de 1600MPa (critère en propagation en considérant la distribution de taille des carbures et une taille maximale de carbure) ; comparaison aux valeurs expérimentales

Dans les deux cas, la ténacité est surestimée à la température de -150°C. La dispersion de la ténacité à la rupture augmente avec la température. A la température de -120°C, la dispersion de ténacité est moins élevée dans le cas de la contrainte critique de 1500MPa qu'avec la contrainte critique de 1600MPa.

La valeur de γ_p est modifiée à la température de -150°C afin de diminuer la ténacité à la rupture. La valeur initiale de γ_p obtenue par Wallin et al. (1984) est de 8.5 J/m^2 ; la probabilité de rupture est recalculée pour les valeurs de 7.5, 7 et 6.5 J/m^2. Les résultats sont présentés sur la figure V-26. La contrainte critique de carbure est de 1500 et 1600MPa.

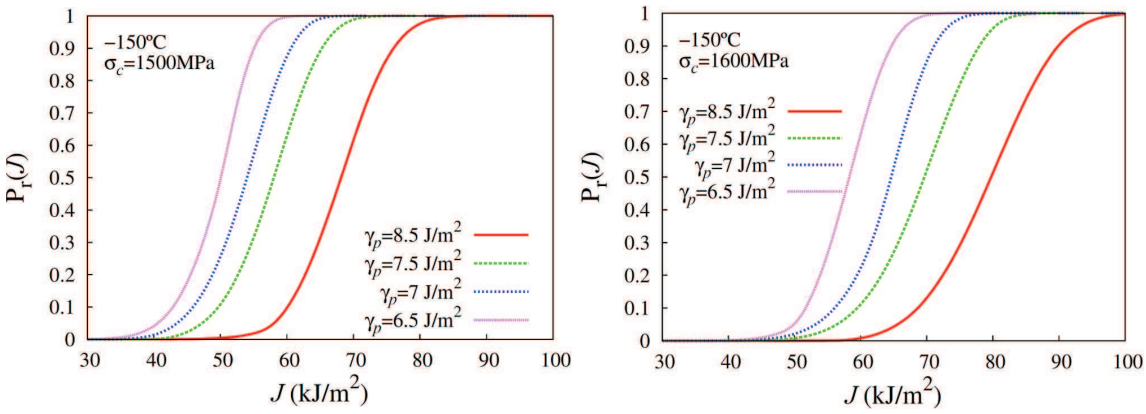


figure V-26 : Distribution de la ténacité pour différentes valeurs de l'énergie équivalente de surface et différentes résistances de carbures

Les courbes de probabilité se décalent vers les valeurs plus basses de ténacité en diminuant l'énergie équivalente de surface. La valeur de 7 J/m^2 est choisie pour l'énergie équivalente de surface à la température de -150°C. L'évolution de la ténacité en fonction de la température pour les probabilités de 1, 50 et 99% avec la valeur de γ_p de 7 J/m^2 et les contraintes critiques de 1500 et 1600MPa sont présentées sur la figure V-27.

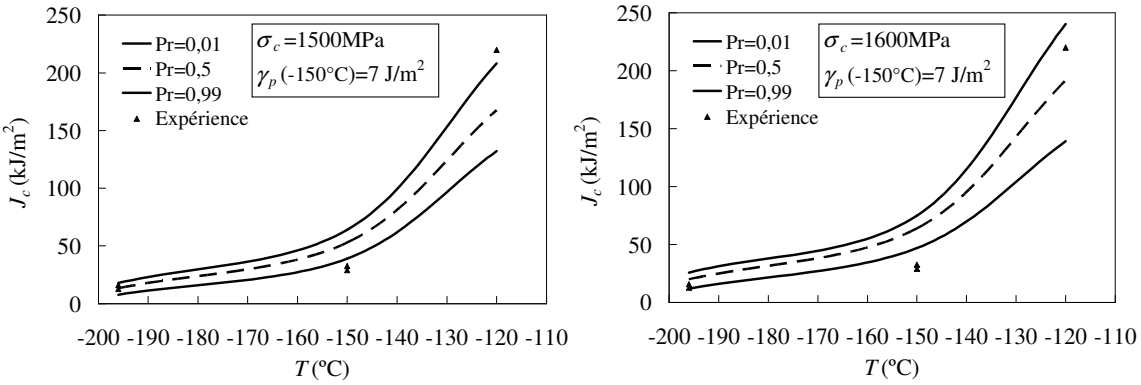


figure V-27 : Evolution de la ténacité à la rupture en fonction de la température avec l'énergie équivalente de surface égale à 7 J/m^2 à la température de -150°C et la contrainte critique de carbure égale à (a) 1500MPa et (b) 1600MPa

Dans les deux cas, la ténacité à la rupture est toujours sur-estimée à la température de -150°C. Cependant la contrainte critique de 1500MPa donne les meilleurs résultats à cette température. Par ailleurs, en considérant qu'il existe des valeurs de ténacité plus élevées à -120°C (en présence de déchirure ductile), on peut penser que ces hypothèses ne suffisent pas pour rendre compte de l'évolution rapide de la ténacité avec la température.

V.5.3 Influence de la fraction des carbures fissurés et émoussés

Les microfissures créées tôt dans l'histoire du chargement, peuvent s'émousser. Ces microfissures ne participent alors plus à la rupture. On pose que si les microfissures ont subi un niveau de déformation équivalente supérieur à $\Delta\varepsilon_0^p$, elles s'émoussent. Seules les microfissures créées entre les déformations $<\varepsilon_{eq}^p>-\Delta\varepsilon_0^p$ et $<\varepsilon_{eq}^p>$ vont participer à la rupture. Sachant que la fraction des microfissures créées après un niveau de déformation plastique équivalente moyenne $<\varepsilon_{eq}^p>$ est de $1-F_{\sigma c}(<\varepsilon_{eq}^p>,T)$, la fraction des microfissures qui ne sont pas émoussées N^E peut être définie comme :

$$N^E(<\varepsilon_{eq}^p>,T)=\begin{cases}\left(1-F_{\sigma_c}(<\varepsilon_{eq}^p>,T)\right)-\left(1-F_{\sigma_c}(<\varepsilon_{eq}^p>-\Delta\varepsilon_0^p,T)\right) & \text{si } <\varepsilon_{eq}^p> \ \geq \ \Delta\varepsilon_0^p \\ 1-F_{\sigma_c}(<\varepsilon_{eq}^p>,T) & \text{si } <\varepsilon_{eq}^p> \ < \ \Delta\varepsilon_0^p\end{cases} \quad \text{(V.27)}$$

L'amplitude de déformation critique $\Delta\varepsilon_0^p$ est un paramètre du modèle. Il pourrait être évalué avec les calculs micromécaniques sur un carbure fissuré dans un milieu homogène en calculant à partir de quelle déformation une fissure peut être considérée comme émoussée. Nous allons ici faire une étude paramétrique sur son influence. En prenant en compte la fraction des carbures qui ne sont pas émoussés, le nombre moyen de carbures par unité de volume soumis à une contrainte supérieure ou égale à une contrainte critique (n_V) peut être récrit comme :

$$n_V{}^{\tau} = \frac{\left(\sigma_1^{\tau}/\sigma_u^*(T)\right)^{2\beta} N_t.N^E(<\varepsilon_{eq}^{p\tau}>,T)}{V_0} \qquad \text{(V.28)}$$

En utilisant cette équation dans les calculs de probabilité, on peut étudier l'influence du paramètre $\Delta\varepsilon_0^p$ sur la probabilité de rupture de l'éprouvette. La figure V-28 montre des probabilités de rupture en fonction de la ténacité à -120°C avec des valeurs de $\Delta\varepsilon_0^p$ égale à 2, 5, 8 et 10%.

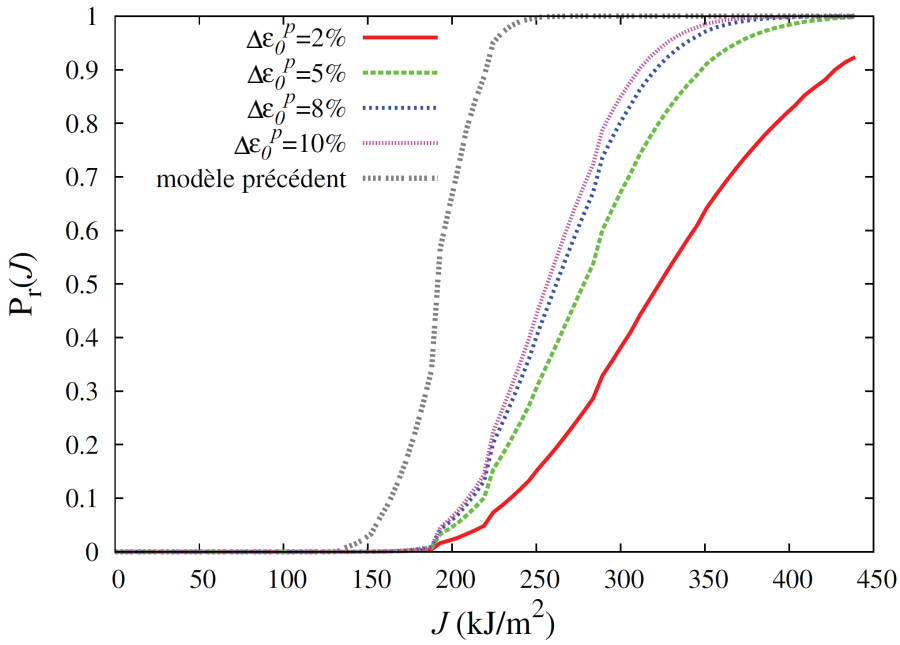


figure V-28 : Evolution de la probabilité de rupture à -120°C pour différente valeur de $\Delta\varepsilon_0^p$ (la contrainte critique du carbure est de 1600MPa)

En diminuant l'amplitude de déformation critique pour l'émoussement $\Delta\varepsilon_0^p$, la ténacité augmente. Cela est attendu, car la fraction des carbures rompus et non émoussés diminue, ce qui diminue la probabilité de rupture.

Les calculs de la probabilité de rupture sont effectués à la température de -150°C avec l'énergie équivalente surfacique de 8,5 J/m^2 (valeur donnée par Wallin) et la contrainte critique de carbure égale à 1600MPa. La déformation seuil d'émoussement $\Delta\varepsilon_0^p$ est de 5, 8 et 10%. Les résultats de calcul montrent des augmentations des valeurs moyennes de la ténacité ainsi que des dispersions lorsque les valeurs de la déformation seuil diminuent (figure V-29).

Afin de pouvoir comparer les ténacités aux différentes températures, un niveau de déformation seuil doit être choisi. L'évolution de la ténacité en fonction de la température pour les probabilités de 1, 50 et 99% est présentée sur la figure V-30. Les valeurs de la déformation seuil et la contrainte critique de carbures sont 10% et 1600MPa respectivement. L'évolution de l'énergie équivalente de surface suit les valeurs proposées par Wallin et al. (1984).

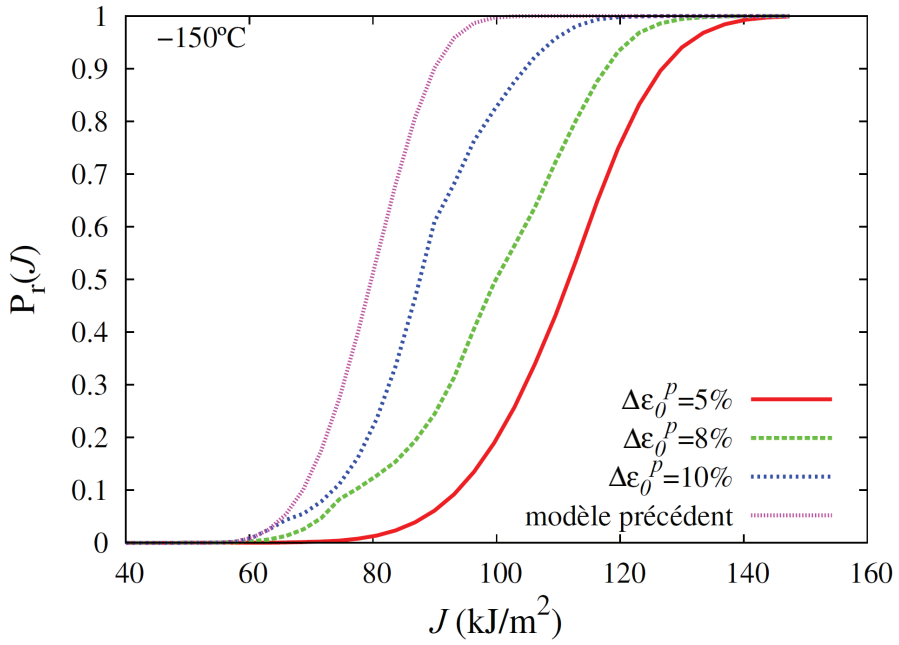


figure V-29 : Evolution de la probabilité de rupture à -150°C pour différentes valeurs de $\Delta\varepsilon_0^p$ (la contrainte critique du carbure est de 1600MPa et la dépendance à la température de l'énergie effective de surface est celle de Wallin)

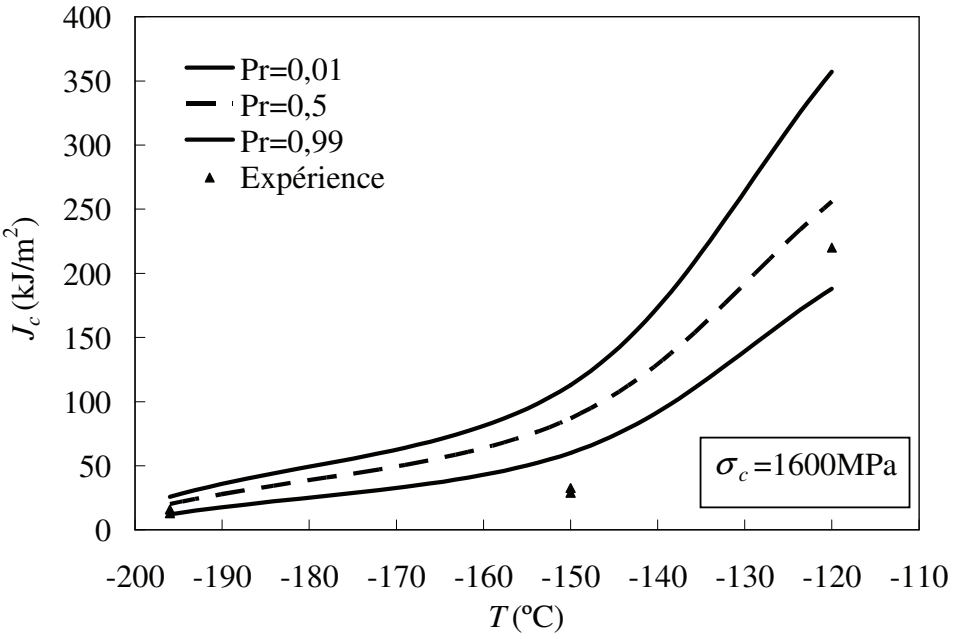


figure V-30 : Evolution de la ténacité en fonction de la température (la contrainte critique de carbure égale à 1600MPa et l'énergie équivalente est celle de Wallin)

La ténacité à -196°C n'est pas influencée par la déformation d'émoussement. Cela est lié au fait que la déformation à la rupture est toujours inférieure à la déformation seuil d'émoussement. Les valeurs de ténacité à la température de -120°C représentent bien le résultat expérimental. Le fait d'introduire la déformation d'émoussement, augmente la ténacité à la température de -150°C. Afin de diminuer ces valeurs, on choisit la contrainte critique de rupture de 1500MPa et l'énergie équivalente de surface de 7 J/m^2. Il faut rappeler que la valeur de 1500MPa pour la

contrainte critique donne des bonnes valeurs de ténacité à la température de -196°C en comparant avec les résultats de essais. La valeur de la déformation minimale est fixée à 10%.

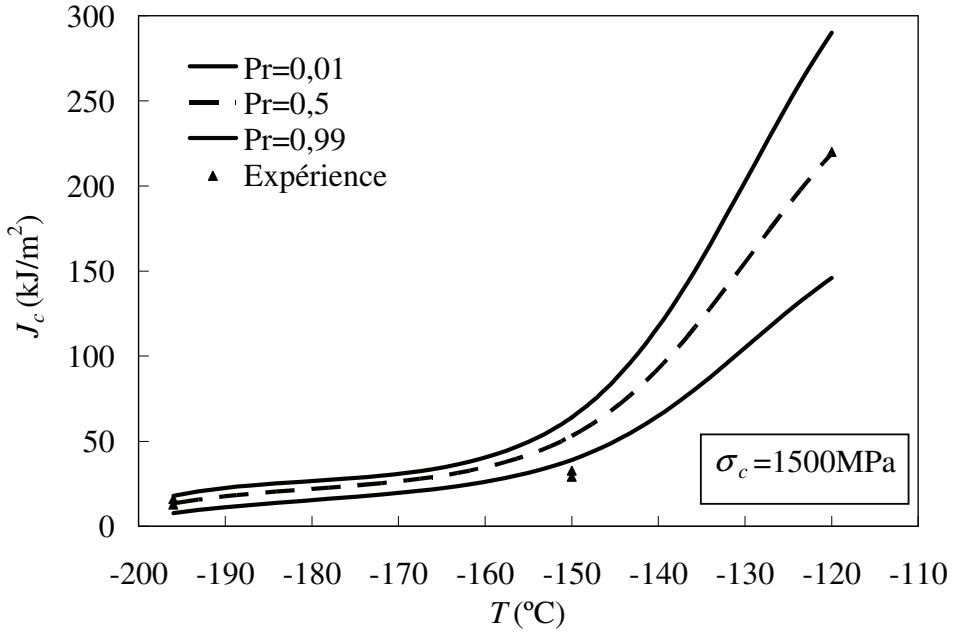


figure V-31 : Evolution de la ténacité à la rupture en fonction de la température (la contrainte critique de carbure égale à 1600MPa et l'énergie équivalente de 7 J/m^2 à la température de -150°C)

En diminuant la contrainte critique et l'énergie équivalente de surface, les valeurs de la ténacité diminuent aux températures de -150 et -120°C. Par contre on surestime toujours la ténacité à la température de -150°C. Ce modèle donne les meilleurs résultats de prédiction de la rupture par rapport aux méthodes précédentes utilisées dans ce travail. Le seul paramètre ajouté dans cette approche est l'amplitude de déformation critique. Ce paramètre peut être identifié ou calculé par les simulations microstructurales.

Le modèle de probabilité macroscopique de rupture développé ici, est basé sur la densité volumique de défauts, alors que de nombreux auteurs font apparaître une probabilité de germination et une probabilité de propagation. La densité volumique des microfissures est calculée à l'aide des modèles polycristallins à l'échelle microscopique. Cette densité est modifiée en utilisent les critères de propagation. C'est-à-dire seule la densité volumique des microfissures susceptibles de propager est prise en compte dans les équations de la probabilité en germination. Ces critères sont développés dans le cadre des approches locales macroscopiques. Le critère de Griffith est utilisé pour définir la fraction volumique des microfissures susceptibles de propager. La distribution de tailles des défauts (carbures) est prise en compte. En introduisant une taille seuil de carbures, on fait apparaître une contrainte seuil pour la propagation des microfissures. Haušild et al. (2005) introduisent une contrainte seuil dans la distribution de la probabilité de Weibull qui intervient directement dans la fonction puissance, afin de rendre compte de l'asymétrie de la distribution de rupture. La contrainte seuil utilisée dans ce travail intervient différemment dans les équations de probabilité, mais sa valeur est proche de celle identifiée par Haušild et al. (2005), excepté qu'elle dépend de la température.

Certains auteurs comme Faleskog et al. (2004), Gao et al. (2006) et Hohe et al. (2010) considèrent que l'émoussement des microfissures est lié au taux de triaxialité des contraintes. En revanche dans ce travail l'émoussement des microfissures est lié à une déformation seuil. L'effet de la triaxialité des contraintes n'est pas pris en compte dans ce travail. Néanmoins, il a été montré dans le chapitre III que le taux de triaxialité à l'instant de rupture pour une éprouvette SENT est proche de 1 à toutes les températures étudiées.

La déchirure ductile n'est pas modélisée dans ce travail, mais les équations de la probabilité développée peuvent être appliquées aux températures plus élevées en présence de déchirure ductile après la modification des champs mécaniques.

V.6 CONCLUSION PARTIELLE

Les calculs par éléments finis sont effectués aux températures de 20, -40, -80, -120, -150 et -196°C sur 9 agrégats avec 3 distributions d'orientations des grains et 3 répartitions des carbures. Les distributions des contraintes dans les carbures sont calculées en faisant la moyenne sur tous les agrégats. Les bandes de localisation de déformation, de contrainte se forment de la même manière à toutes les températures étudiées. En revanche, les niveaux des contraintes et des densités de dislocation ne sont pas identiques aux différentes températures à déformation macroscopique donnée.

La distribution des contraintes dans les carbures est calculée à toutes les températures et aux différents niveaux de déformation plastique équivalente moyenne. La dispersion de ces contraintes est liée à l'hétérogénéité des champs mécaniques dans la microstructure. Cette dispersion est plus importante aux températures plus élevées. Une fonction de type Weibull est identifiée sur ces distributions. Cette fonction est exprimée en température et déformation plastique équivalente moyenne. Deux paramètres parmi les 3 paramètres de cette fonction peuvent être identifiés à l'aide de la courbe d'écrouissage du matériau.

La probabilité de rupture élémentaire est écrite en considérant une distribution de Poisson pour la répartition spatiale des carbures. Cette probabilité est ainsi fonction de la température et de la déformation plastique équivalente moyenne.

La probabilité de rupture uniquement basée sur la germination des microfissures est appliquée sur une éprouvette SENT aux températures de -196, -150 et 120°C. En utilisant la contrainte critique de carbure identifiée à la température de -196°C, les probabilités de rupture sont calculées aux températures de -150 et -120°C. La ténacité est sous-estimée avec cette méthode à la température de -120°C.

Dans la deuxième approche, la probabilité de rupture de l'éprouvette est calculée avec le critère de propagation basé sur l'expression de Griffith. Cette fois, la probabilité de rupture est aussi fonction de la contrainte principale maximale. La distribution de la taille de carbures n'est pas prise en compte et l'évolution de l'énergie équivalente de surface est celle utilisée par Wallin et al. (1984). Le résultat du calcul de la probabilité de rupture à la température de -120°C est déterministe, en revanche il est du bon ordre de grandeur par rapport aux résultats expérimentaux. La distribution des tailles des carbures est prise en compte dans le critère de propagation. Les résultats de probabilité obtenue avec la contrainte critique identifiée à la

température de -196°C montre une dispersion importante à la température de -120°C, par contre les valeurs de ténacité sont sous-estimées à cette température.

Une taille maximale de carbure est ajoutée à la distribution de taille des carbures. On introduit donc une contrainte seuil dans la distribution de résistance à la propagation des microfissures. La ténacité prévue à la température de -120°C est du bon ordre de grandeur par rapport à l'expérience. En revanche la ténacité est surestimée à la température de -150°C.

La fraction des carbures rompus mais émoussés pendant le chargement est pris en compte en introduisant une déformation au-delà de laquelle les microfissures dans les carbures seront émoussées et ne pourront pas participer à la rupture finale par clivage. Cette fraction des microfissures est éliminée dans les calculs des probabilités de rupture. Cela fait augmenter encore les valeurs et la dispersion des ténacités. En revanche, on surestime davantage encore la ténacité à la température de -150°C. En utilisant un contrainte critique et une énergie équivalente de surface plus basse, on peut diminuer cet écart.

Les différentes études de ce travail montrent que la germination peut être importante à basse température, car la contrainte d'écoulement est élevée et donc la propagation est quasiment assurée ; lorsque la température augmente et que la contrainte d'écoulement baisse, c'est le critère de propagation qui est le plus important avec sans doute une faible influence de la germination et donc de la déformation plastique. Puis lorsque la température augmente encore et que la contrainte d'écoulement baisse davantage, la germination des microfissures est de nouveau importante à cause de l'émoussement des premières microfissures créées.

La densité volumique de microfissures est obtenue directement à partir des calculs de microstructure. Les paramètres ajustables dans le modèle de probabilité de rupture sont la contrainte critique de rupture des carbures et l'énergie équivalente de surface (à chaque température), ainsi que l'amplitude de déformation critique. Ce dernier paramètre peut être estimé par des calculs d'émoussement.

On doit noter que nous avons étudié un seul cas de chargement macroscopique dans nos calculs micromécaniques.

CONCLUSION GENERALE ET PERSPECTIVES

L'objet de ce travail était d'étudier la rupture fragile des aciers à l'aide des approches polycristallines. En effet, les approches locales purement macroscopiques se sont avérées insuffisantes pour prédire la rupture par clivage à des températures différentes. Pour cette étude, le choix d'un acier sphéroïdisé avec des grains ferritiques et des carbures sphéroïdisés nous a permis de : 1) faire des hypothèses sur le mécanisme élementaire de création des germes de clivage, 2) modéliser une microstructure simple avec une représentation explicite des défauts à l'origine des germes de clivage. Ce travail orienté modélisation numérique a été enrichi avec des résultats expérimentaux.

L'étude bibliographique a permis de rappeler que les aciers ferritiques comportant des carbures sphéroïdisés ou des films de cémentite rompent par clivage à l'issue de l'extension d'une microfissure présente dans un carbure. Le nombre de ces microfissures augmente avec la déformation plastique et diminue avec la température. Cependant, les approches locales macroscopiques les plus couramment appliquées, telle que le modèle RKR ou le modèle de Beremin, ne prennent pas en compte cette évolution de densité volumique de défauts. Ces approches ne permettent pas de prédire la rupture par clivage dans la transition ductile-fragile à partir du comportement en clivage à des températures plus faibles. Différentes explications sont possibles. On note que les sites de rupture peuvent donner à penser que la déformation est une variable importante pour le clivage. L'étude bibliographique indique ainsi une évolution plus ou moins récente dans la formulation des modèles macroscopiques d'approche locale du clivage : l'introduction de la germination des microfissures de clivage avec l'influence de la déformation macroscopique. L'émoussement de ces microfissures est également parfois introduit par le biais du taux de triaxialité des contraintes. Enfin, des approches micromécaniques basées sur le comportement cristallin des aciers ont également été mises en œuvre. Elles mettent en évidence une origine supplémentaire pour la dispersion du comportement à la rupture : l'hétérogénéité des champs mécaniques à l'échelle cristalline. Néanmoins, la distribution de taille de carbure doit être introduite : celle-ci pilote la distribution de taille de microfissure. Par ailleurs, le passage à l'échelle macroscopique n'a pas été complété par une prédiction de ténacité.

Pour obtenir des résultats expérimentaux guidant la simulation numérique ultérieure, un traitement thermique a été effectué sur un acier C35R initialement ferrito-perlitique afin d'obtenir des carbures globulaires. Les observations microscopiques ont permis de déterminer la distribution de taille des carbures et des grains. Seuls les carbures aux joints grains avec un diamètre supérieur à 1.5 µm ont été choisis pour être modélisés dans les simulations par éléments finis. En effet, leur taille et leur positionnement aux joints de grains les rendent plus sensibles à la rupture. Les essais de traction simple sont réalisés dans une gamme de

température entre -196 et 20°C afin de déterminer le comportement mécanique du matériau pour les modélisations. La transition de comportement est observée. Nous avons constaté par les essais de ténacité réalisés sur les éprouvette SENT que la rupture est brutale entre les températures -196 et -120°C. Néanmoins, à la température de -120°C, la déchirure ductile est observée sur certaines éprouvettes avant la rupture par clivage. La rupture est totalement ductile à partir de la température de -40°C. Ainsi, la ténacité augmente brutalement aux températures supérieures à -120°C. Les observations fractographiques montrent que le déclenchement du clivage n'est pas multi-site. On a observé des inclusions de sulfure de manganèse décollées et des carbures rompus sans qu'il soit possible de déterminer exactement l'origine du clivage. Il a été montré par les simulations éléments finis que les sites d'amorçage du clivage se situent entre l'entaille et le maximum de la contrainte principale maximale aux températures de -196 et -150°C. Cela signifie que ces sites ont déjà subi des niveaux de contrainte principale maximale importants. Cela remet en cause les modèles du clivage basés uniquement sur un critère en extension de microfissure et donc uniquement sur la contrainte.

La partie simulation a débuté par des simulations par élément finis sur des microstructures idéalisées et un comportement cristallin issu de la littérature. L'objectif était d'obtenir la distribution des contraintes dans les carbures afin de déterminer la fraction des carbures susceptibles de rompre et de créer des microfissures de clivage. Des études paramétriques ont été réalisées sur des agrégats polycristallins avec des grains ferritiques hexagonaux ou polygonaux. Les carbures ont été modélisés sous la forme de disques avec un comportement élastique isotrope répartis aléatoirement dans la microstructure. Un tirage aléatoire a permis de définir des orientations cristallines des grains. Les comparaisons entres les simulations polycristallines et celles avec un milieu homogène équivalent montrent que la dispersion des contraintes est plus importante dans le cas de simulations polycristallines. Cette dispersion est liée à l'hétérogénéité des champs mécaniques due à la loi cristalline. De plus, des valeurs plus élevées des contraintes dans les carbures ont été observées avec les simulations polycristallines.

L'influence de plusieurs paramètres a été étudiée sur le comportement global de l'agrégat ainsi que sur la distribution des contraintes dans les carbures. Ces paramètres sont :

- la distribution des orientations cristallines des grains : trois tirages aléatoires ont été effectués afin de déterminer trois distributions d'orientations cristallines des grains.
- La répartition spatiale des carbures : deux répartitions spatiales des carbures dans la microstructure et une répartition spatiale des carbures aux joints grains ont été effectuées.
- La taille des carbures : deux tailles des carbures par rapport aux tailles des grains ont été considérés.
- La morphologie des grains : des microstructures avec des grains hexagonaux et polygonaux ont été créées.

Le comportement global de la microstructure n'est pas influencé par ces paramètres à composition fixée. La distribution des contraintes dans les carbures est peu sensible à ces

paramètres. Le choix des grains hexagonaux semble ne pas être critique. Par contre, la distribution des contraintes dans les carbures est un peu plus dispersée dans le cas des carbures aux joints grains. Cela est lié à la distribution spatiale moins homogène des carbures aux joints de grains. L'influence des orientations cristallines des grains entourant un carbure, sur le chargement du carbure a été étudiée. Il a été montré que le chargement de carbures dépend de la déformation des grains. Par contre, aucune relation n'a été trouvée entre les désorientations locales et le chargement des grains. Le nombre de calculs est insuffisant.

Les paramètres du modèle cristallin ont été identifiés sur les résultats des essais de traction de l'acier C35R sphéroïdisé en fonction de la température. Seuls deux paramètres sont considérés dépendants de la température : le libre parcours moyen des dislocations et le terme associé à l'annihilation des dislocations. Il a été montré que la distribution des contraintes dans les carbures n'est pas influencée par les différents jeux de paramètres de la loi cristalline qui reproduisent le même comportement global de l'agrégat.

Les distributions des contraintes moyennes dans les carbures ont été calculées par les simulations éléments finis aux températures de 20, -40, -80, -120, -150 et -196°C. Ces distributions ont été obtenues sur 9 agrégats avec 3 distributions d'orientations des grains et 3 répartitions des carbures aux joints de grains : la microstructure ne représente pas exactement un volume élémentaire représentatif vis-à-vis de la distribution des contraintes dans les carbures et plusieurs simulations sont utilisées pour obtenir une distribution moyenne. Cette distribution est représentée à l'aide d'une fonction de type Weibull dont les paramètres sont fonctions de la température et de la déformation plastique équivalente moyenne.

La prédiction de la rupture par clivage est basée sur une approche probabiliste en faisant l'hypothèse d'une contrainte de rupture unique pour les carbures. Une probabilité élémentaire de germination des microfissures a été déterminée à partir de la distribution des contraintes dans les carbures.

La probabilité élémentaire de germination est utilisée comme probabilité de rupture et appliquée à une éprouvette SENT aux températures de -196, -150 et -120°C. Pour une contrainte de rupture des carbures identifiée à -196°C, ce modèle sous-estime nettement la ténacité à la température de -120°C.

Des modèles de probabilité de rupture basés sur un critère en propagation ont alors été développés à partir de différentes hypothèses :

- critère de propagation déterministe (distribution de taille des carbures monodisperse) basé sur l'expression de Griffith en prenant en compte l'évolution de l'énergie de surface équivalente proposée par Wallin et al. (1984). La probabilité de rupture est ainsi fonction de la contrainte principale maximale. Le résultat du calcul de la probabilité de rupture est du bon ordre de grandeur mais le résultat devient déterministe lorsque la température augmente car la densité de microfissures est très grande lorsque le critère de propagation est atteint.

- Critère de propagation basé sur le critère précédent, en prenant aussi en compte la distribution des tailles des carbures. La probabilité de rupture montre une dispersion plus importante à la température de -120°C, mais la ténacité est sous-estimée.
- Critère de propagation basé sur le critère précédent en ajoutant une taille maximale de carbure. Cela introduit une contrainte seuil dans la distribution de résistance à la propagation des microfissures. La ténacité est surestimée à la température de -150°C.
- Critère de propagation basé sur le critère précédent en introduisant une déformation équivalente moyenne critique d'émoussement. Les microfissures qui subissent un niveau de déformation supérieur à cette déformation critique, vont s'émousser. Cette déformation critique a été identifiée sur les résultats expérimentaux. La dispersion de la ténacité est bien reproduite à la température de -120°C, mais on surestime encore la ténacité à la température de -150°C. En ré-identifiant la contrainte critique de carbure et en diminuant la valeur de l'énergie équivalente surfacique à la température de -150°C, on prédit mieux la ténacité aux température de -190, -150 et -120°C.

Ces simulations montrent que l'on doit prendre en compte l'évolution de la densité volumique des microfissures avec le chargement, l'extension des microfissures de taille variable ou leur émoussement. L'importance des différents critères dépend de la température. On rejoint ainsi les tendances actuelles sur le développement des approches locales macroscopiques. L'approche macroscopique présentée ici est basée en partie sur des calculs micromécaniques prenant en compte les hétérogénéités de champs mécaniques provenant de la microstructure polycristalline.

PERSPECTIVES

La dispersion de la ténacité à la rupture n'a pas pu être bien prise en compte dans ce travail, car le nombre des essais réalisés était faible. La caractérisation expérimentale plus poussée de l'acier étudié permettrait de mieux d'approfondir cette étude sur les grandeurs macroscopiques mais aussi sur les sites de rupture. Des essais de ténacité in-situ sur les micro-éprouvettes peuvent mettre en évidence la microstructure critique de la rupture. Un dispositif d'essai de ténacité à froid dans un MEB a été développé en parallèle par E. Perrin au L.MSSMat mais n'a pas été utilisé faute de temps. Cependant, les carbures même sphéroïdisés, sont de petites tailles et le dispositif ne permet pas d'avoir de fort grandissement.

Les carbures modélisés dans la microstructure est sous forme de disques avec une taille constante, tandis que les carbures observés au sein de la microstructure de l'acier C35R ne sont pas parfaitement ronds et montre une dispersion de taille. Un meilleur traitement thermique peut créer les carbures plus ronds avec des tailles moins dispersées pour être plus cohérent avec les simulations. Les traitements thermiques avec oscillation de la température autour du palier A1 donnent une meilleure globularisation des carbures. Cela nécessite de bons équipements notamment un four avec une faible inertie thermique.

La relation entre le chargement du grain et les désorientations locales peut définir une grandeur physique pour déterminer le carbure susceptible de rompre. Aucune relation entre le chargement du grain et les désorientations locales n'a été mise en évidence dans ce travail. De nombreuses simulations supplémentaires sont nécessaires afin de déterminer une relation entre les désorientations locales des grains aux premiers ou seconds voisins. Cela peut définir la possibilité des situations critiques pour le clivage vis-à-vis des orientations cristallines entre grains voisins.

La microstructure étudiée dans ce travail est créée en 2D et une extension dans la troisième direction nous a permis de prendre en compte l'hétérogénéité des variables mécaniques due à la loi polycristalline. Les contraintes dans les carbures peuvent être influencées par les simulations sur un agrégat volumique 3D. En plus la forme sphérique des carbures dans le cas 3D peut modifiée l'états de contraintes dans les carbures. Un agrégat tridimensionnel avec des grains polyédriques et des particules sphériques a été créé par une collaboration avec Serge Pascal du CEA. Mais il n'a pas été possible de réaliser l'étude avec ces agrégat 3D par manque de temps.

L'émoussement des microfissures germinées est exprimé à l'aide d'une déformation équivalente moyenne critique d'émoussement. Cela a été identifié sur les résultats de essais. Cette grandeur peut être calculée avec les simulations micromécaniques sur un carbure fissuré dans un milieu homogène. L'émoussement des microfissures germinées peut dépendre de taux de triaxialité des contraintes. Cela n'est pas pris en compte dans ce travail. Cet effet peut être étudié en imposant des contraintes sur les bords de l'agrégat. Néanmoins, il a été montré dans ce travail que le taux de triaxialité des contraintes varie très peu autour de 1, aux sites de l'amorçage.

Certains paramètres de la probabilité de rupture comme la contrainte critique des carbures et la déformation seuil de l'émoussement sont identifiés sur les résultats des essais de ténacité sur les éprouvettes SENT. Il est nécessaire de pouvoir valider ces paramètres sur d'autres types d'éprouvette. Les essais de rupture sur d'autres géométries d'éprouvette nous permettraient de valider les équations de probabilité développée dans ce travail.

L'effet d'orientation cristalline d'un grain sur la propagation de fissure d'un carbure peut être étudiée à l'aide des simulations éléments finis. En changeant l'orientation cristalline d'un grain qui entoure un carbure sphérique fissurée, on peut réaliser une étude paramétrique. L'existence d'orientations cristallines critiques pour la propagation pourrait être déduite. Les effets dynamiques pourraient être étudiées, ainsi que Kroon et Faleskog (2005), l'ont fait mais en considérant une matrice isotrope.

BIBLIOGRAPHIE

Anderson T.L. (1994) Fracture Mechanics: Fundamentals and Applications, *CRC Press.*

Argon A.S., Im J., Safoglu R. (1975) Cavity formation from inclusion in ductile fracture. *Met. Trans.* **6A**, 825-837.

Barber C.B., Dobkin D.P. et Huhdanpaa H.T. (1996) The Quickhull algorithm for convex hulls, *ACM Transactions on Mathematical Software* **22**, 469–483.

Belotteau J. (2009) Prévision de la déchirure en présence de vieillissement dynamique dans mes aciers de circuit secondaire des R.E.P. *thèse Ecole Centrale Paris.*

Beremin F.M. (1981) Cavity formation from inclusion in ductile fracture of A508 steel. *Met. Trans.* **12A**, 723-731.

Beremin F. (1983) A local criterion for cleavage of a nuclear pressure vessel steel. *Met. Trans.* **14A**, 2277-2287.

Bernauer G., Brocks W., Schmitt W. (1999) Modifications of the Beremin model for cleavage fracture in the transition region of a ferritic steel. *Engineering Fracture Mechanics* **64,** 305-325.

Besson J. (2004) Local approach to fracture, mettre tous les auteurs, *Les presses Ecole des Mines de Paris.*

Bordet S.R., Karstensen A.D., Knowles D.M., Wiesner C.S. (2005) A new statistical local criterion for cleavage fracturein steel. Part I: model presentation. *Engineering Fracture Mechanics* **72**, 435-452.

Bordet S.R., Karstensen A.D., Knowles D.M., Wiesner C.S. (2005) A new statistical local criterion for cleavage fracture in steel. Part II: application to an offshore structural steel. *Engineering Fracture Mechanics* **72**, 453-474.

Bowen P., Druce S.G., Knott J.F. (1986) Effects of microstructure on cleavage fracture in pressure vessel steel. *Acta Met.* **34**, 1121-1131.

Bowen P., Druce S.G., Knott J.F. (1987) Micromechanical modelling of fracture toughness. *Acta Met.* **35**, 1735-1746.

Bowen P., Hippsley C.A., Knott J.F. (1984) Effects of segregation on brittle fracture and fatigue crack growth in coarse-grained, martensitic A533B pressure vessel steel. *Acta Met.* **32**, 637-647.

Brozzo P., Buzzicheli G., Manscanzoni A., Mirabile M. (1978) Microstructure and cleavage resistance of low carbon bainitic steels. *Metal Science,* **11**, 123-129.

Che L., Gotoh M., Horimoto Y., Hirose Y., Yang L. (2008) Characterization of Deformability of Spheroidal Cementite by Residual Stress Measurement, Journal of Materials Engineering and Performance, **17(3)**, 445-453.

Chen J.H., Wang Q., Wang G.Z., Li Z. (2002) Fracture behavior at crack tip - a new framework for cleavage mechanism of steel. *Acta Materialia* **51,** 1841-1855.

Cottrell A.H. (1958) Theory of brittle fracture in steel and similar metals. *Transactions of the metallurgical society of AIME* **212**,192-203.

Curry D.A. (1980) Comparison between two models of cleavage fracture. *Metal Science*, Short Communication, 78-80.

Curry D.A. (1980) Cleavage micromechanisms of crack extension in steels, *Metal Science*, **14**, 319-326.

Curry D.A., Knott J.F. (1976) The relationship between fracture toughness and microstructure in the cleavage fracture of mild steel. *Metal Science*, 1-5.

Curry D.A., Knott J.F. (1978) Effect of microstructure on cleavage fracture stress in steels. *Metal Science*, 511-514.

Curry D.A., Knott J.F. (1979) Effect of microstructure on cleavage fracture toughness of quenched and tempered steels. *Metal Science*, 341-345.

Curry D.A., Knott J.F. (1984) Cleavage fracture of A533B pressure vessel steel in martensitic condition. *Metal Science*, 225-235.

De Berg M., Cheong O., Van Kreveld M., Overmars M. (2008) Computational Geometry: Algorithms and Applications. *Springer-Verlag*.

Echeverria A., Rodriguez-Ibabe J.M (2003) The role of grain size in brittle particle induced fracture of steels. *Mat. Science and Eng.* **A346** , 149-158.

François D., Pineau A. et Zaoui A., "Comportement Mécanique des Matériaux" Elasticité et Plasticité", Hermès, 1991.

François D., Pineau A. et Zaoui A., "Comportement Mécanique des Matériaux" "Viscoplasticité, Endommagement, Mécanique de la Rupture, Mécanique du Contact", Hermès, 1991.

Gao X., Zhang G., Srivatsan T.S. (2006) A probabilistic model for prediction of cleavage fracture in the ductile-to-brittle transition region and the effect of temperature on model parameters. *Materials Science and Engineering* **A415,** 264-272.

Griffith A.A. (1920) The phenomena of rupture and flow in solids. *Phil. Trans. Soc.* **A221**, 163-198.

Griffith J.R., Owen D.R.J. (1971) An elastic-plastic stress analysis for a notched bar in plane strain bending. *J. Mech. Phys. Solids* **19**,419-431.

Gurland J. (1972) Observation on the fracture of cementite particles in a spheroidized 1.05% steel deformed at room temperature, *Acta Metallurgica* **20**, 735-741.

Haušild P. (2002) Transition ductile-fragile dans un acier faiblement allié, *thèse Ecole Centrale Paris.*

Haušild P., Berdin C., Bompard P. (2005) Prediction of cleavage fracture for a low-alloy steel in the ductile-to-brittle transition temperature range. *Materials Science and Engineering* **A 39,** 188–197.

Jayatilaka A., Trustrum K. (1977) Statistical approache to brittle fracture, *J. of Material Sience*, **12**, 1426-1430

Faleskog J., Kroon M., Öberg H. (2004) A probabilistic model for cleavage fracture with a length scale-parameter estimation and predictions of stationary crack experiments, *Engineering Fracture Mechanics*, **71**, 57-79.

Kroon M., Faleskog J. (2005) Micromechanics of cleavage fracture initiation in ferritic steels by carbide cracking. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **53,** 171-196.

Kocks U.F. (1976) Laws for work-hardening and low-temperature creep, *J. Eng. Mat. Tech.*, 76–85.

Libert M. (2007) Etudes expérimentale et numérique de l'effet des mécanismes de plasticité sur la rupture fragile par clivage dans les aciers faiblement allies. *thèse Ecole Centrale Paris.*

Lindley T.C., Oates G., Richards C.E. (1970) A critical appraisal of carbide cracking mechanism in ferried/carbide aggregates. *Acta Metallurgica* **18**, 1127-1135.

Liu C.T., Gurland J. (1968) The behavior of spheroidized carbon steels*, Trans. of the ASM* **61**,156-167.

Mäntylä M., Rossoll A., Nedbal I., Prioul C., Marini B. (1999) Fractographic observations of cleavage fracture initiation in a bainitic A508 steel. *Journal of Nuclear Materials* **264,** 257-262.

Margolin B.Z., Gulenko A.G., Shvetsova V.A. (1998) Probabilistic model for fracture toughness prediction based on the new local fracture criteria. *International Journal of Pressure Vessels and Piping* **75**, 307-320.

Mathieu J.P. (2006) Analyse et modélisation micromécanique du comportement et de la rupture fragile de l'acier 16MND5 : prise en compte des hétérogénéités microstructurales. *thèse Ecole Nationale Supérieurs d'Arts et Métiers Metz.*

Mizubayashi H., Li S.J., Yumoto H., Shimotomai M. (1999) Young's modulus of single phase cementite, *Scripta Materialia*, **40 (7)**, 773–777

McMahon C.J., Morris Cohen (1965) Initiation of cleavage in polycrystalline iron. *Acta Metall.* **13**, 591-604.

Needleman A., Tvergaard V. (1984) Analysis of the cup-cone fracture in a round tensile bar. *Acta Met.,* **32***,*151-183.

Needleman A.,Tvergaard V. (1987) An analysis of ductile rupture modes at a crack tip. *J. Mech. Phys. Solids* **35***,*151-183.

Nguyen N.C. (2010) Modélisation du comportement en plasticité et a rupture des aciers bainitiques irradiés. *thèse ENSMP*.

Osipov N. (2007) Génération et calcul de microstructures bainitiques, approche locale intergranulair de la rupture, *thèse ENSMP*.

Petch N.J. (1987) The influence of grains boundary carbides and grain size on the cleavage strength and impact transition temperature of steel. *Acta Metall.* **34**, 1387-1393.

Peirce D., Asaro R.J., Needleman A. (1983) Material rate dependence and localized deformation in crystalline solids. *Acta metallurgica* **31**, 1951-1976.

Renevey S. (1998) Approches globale et locale de la rupture dans le domaine de transition fragile-ductile d'un acier faiblement allie. *Thèse universite de paris-sud.*

Rice J., Tracey D. (1969) On the ductile enlargement of voids in triaxial stress fields. *J. Mech. Phys. Solids* **17**,201-217.

Rice J.R., Rosengren G.F. (1968) Plane strain deformation near a crack tip in a power-law hardening material, *J. Mech. Phys.* **16**,1-12

Ritchie R.O., Knott J.F., Rice J.R. (1973) On relationship between critical tensile stress and fracture toughness in mild steel. *J. Mech. Phys. Solids*, 395-410.

Rossoll A. (1998) étermination de la ténacité d'un acier faiblement allié à partir de l'essai Charpy instrumenté. *thèse Ecole Centrale Paris.*

Rossoll A., Berdin C., Prioul C. (2002) Determination of the fracture toughness of a low alloy steel by the instrumented Charpy impact test. *Int. J. Fracture* **115**, 205-226.

Rousselier G. (1987) Ductile fracture models and their potential in local approach of fracture. *Nuclear Eng. and Design* **105**, 97-111.

Saario T. , Wallin K . , Törrönen K. (1984) On the microstructure basis of cleavage fracture initiation in ferritic and bainitic steels, *Journal of Engineering Materials and Technology*, **106**, 173-177.

Schwartz J. (2011) approche non locale en plasticite cristalline : application a l'etude du comportement mecanique de l'acier aisi 316ln en fatigue oligocyclique. *thèse Ecole Centrale Paris*.

Smith E. (1966) The nucleation and growth of cleavage microcracks in mild steels. In Institute of Physics and physical Society editor*, Physical basis of yield and fracture : conference proceeding Oxford, September,* 36-64.

Springmam M., Kuna M. (2003) Identification of material parameters of the Rousselier model by non-linear optimization. *Comp.Mat. Science* **26**, 202-209.

Steglich D., Brocks W. (1998) Micromechanical modeling of damage and fracture of ductile materials. *Fatigue and Fract. Eng. Mat. & Struc.* **21***,* 1175-1188.

Teodosiu C., Raphanel J.L., Tabourot L. (1991) Finite implementation of the large elastoplastic deformation of multicrystals. *Proc. Int. Seminar MECAMAT'91*, 153-168.

Tanguy B. (2001) Modélisation de l'essai charpy par l'approche locale de la rupture-Application au cas de l'acier 16MND5 dans le domaine de la transition, *thèse ENSMP*.

Tanguy B., Besson J., Piques R., Pineau A. (2005) Ductile to brittle transition of an A508 steel characterized by Charpy impact test Part II: modeling of the Charpy transition curve. *Eng. Fract. Mech.* **72,** 413–434.

Thompson A., Knott J. (1993) Micromechanisms of brittle fracture. *Met. Trans. A* **24**,523-534.

Tvergaard V. (1981) Influence of voids on shear band instabilities under plane strain condition. *Int.l J. fract.* **17**, 237-252.

Wallin K., A. Laukkanen (2008) New developments of the Wallin, Saario, Törrönen cleavage fracture model, *Engineering Fracture Mechanics*, **75**, 3367-3377.

Wallin K., Saario T., Törrönen K. (1984) Statistical model for carbide induced brittle fracture in steel. *Metal Science* **18**, 13-16.

Wang G.Z., Chen J.H. (2004) Cleavage Fracture Criterion of Low Alloy Steal and Weld Metal in Notched Specimens. *International Journal of Fracture* **89**, 269-284.

Yang W.J., Lee B.S., Ohc Y.J., Huha M.Y., Hong J.H. (2003) Microstructural parameters governing cleavage fracture behaviors in the ductile-brittle transition region in reactor pressure vessel steels. *Materials Science and Engineering* **A 379**, 17-26.

Zhang Z.L., Hauge M. (1998) On the Gurson micro-mechanical parameters. *Fatigue and Fract. Mech* .**29**,1-20.

Zener C. (1948) Fracturing of Metals, *ASM, Cleveland, OH*, p.3.

ANNEXES

ANNEXE A

GENERATEUR DE NOMBRES PSEUDO-ALEATOIRES
METHODE DE CONGRUENCE LINEAIRE

Un générateur de nombres pseudo-aléatoires est utilisé pour générer :

- les centres des particules,
- les angles d'Euler,
- les centres des polyèdres de Voronoï.

La séquence de nombres générés n'est pas entièrement aléatoire car on peut prévoir le nombre suivant dans la séquence, mais elle a une distribution uniforme. La méthode de congruence linéaire est utilisée dans ce travail. La méthode est basée sur une équation de récurrence :

$$X_{n+1} = (a.X_n + c) \bmod m$$

$$r_n = X_{n+1} / m$$

Avec *m*, *a* et *c*, les paramètres de la méthode. On engendre une séquence de nombres pseudo-aléatoires compris entre 0 et 1 à partir d'un « germe » X_0. L'algorithme produit la même séquence, après une certaine génération de nombres, ce qui pose le problème de périodicité de la séquence. La période peut être calculée dans quelques algorithmes. La périodicité de méthode dépend des paramètres et peut atteindre au maximum la valeur *m*. Ainsi la qualité de la méthode dépend beaucoup du choix de ces paramètres. La valeur *m* est souvent fixée à la longueur des

mots sur la machine (par exemple 32 ou 64 bits). Les paramètres utilisés dans ce travail ont été proposés par D. Jeulin (Berdin et al.,1996) :

a=1000, m=2001179 et c=0.

Afin de vérifier l'homogénéité de la distribution, 2 séquences de nombre sont produites pour 100 et 1000 points. On peut voir que la séquence produite suit bien une loi uniforme (Figures A.1 a et b A2. a et b).

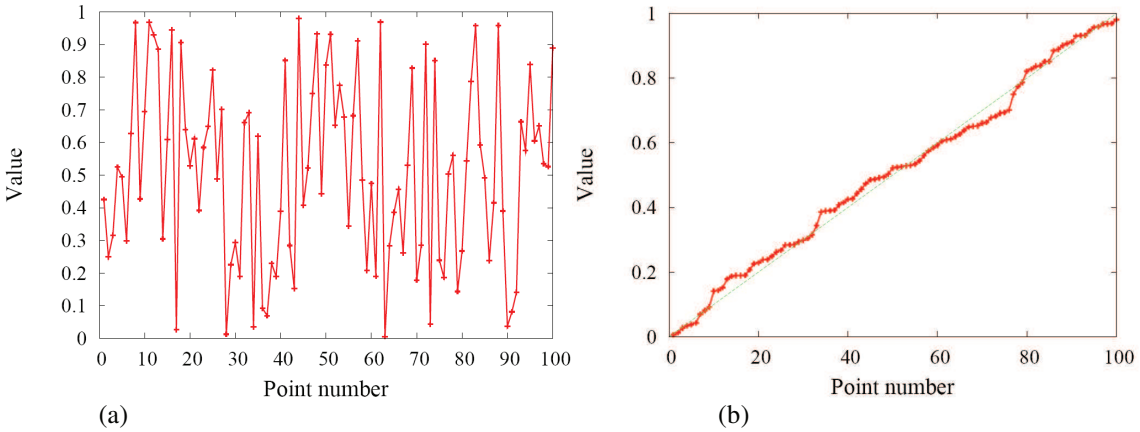


Figure A. 1 : Valeurs obtenues pour un tirage aléatoire de 100 points (a) valeur dans l'ordre de génération (b) valeur dans l'ordre croissant

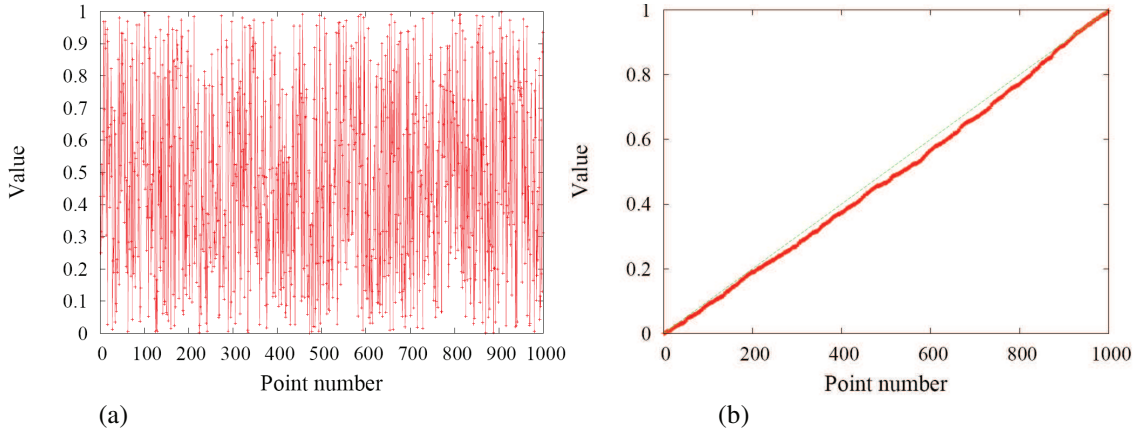
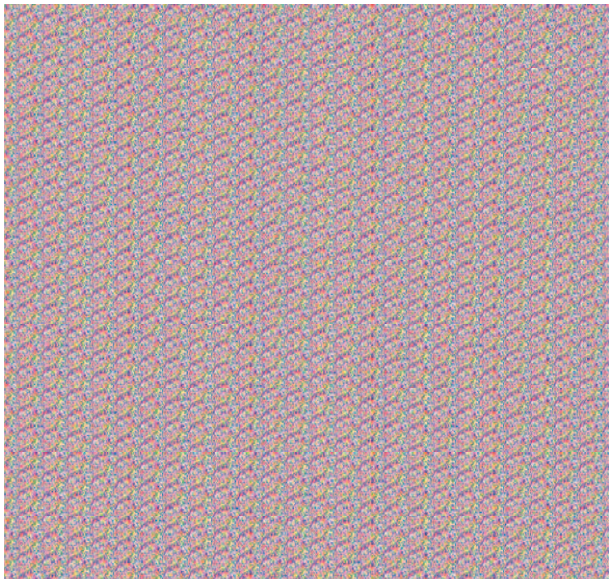


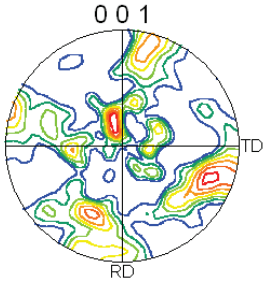
Figure A. 2 : Valeurs obtenues pour un tirage aléatoire de 1000 points (a) valeur dans l'ordre de génération (b) valeur dans l'ordre croissant

Cette méthode est utilisée pour produire les angles d'Euler pour la distribution des orientations cristallographiques. Les orientations sont importées dans le logiciel OIM pour pouvoir visualiser les orientations par différentes couleurs.

Les figures A.3 et A.4 montrent une distribution avec 500 000 orientations. Chaque orientation est constituée par 3 angles d'Euler, donc 1 500 000 nombres sont produits (supérieur à m). On note que l'on produit un polycristal isotrope. Cependant, une forte périodicité est observée. Afin d'éviter la périodicité, le germe à été changé après chaque 100 000 nombres produits en utilisant comme germe initial le dernier nombre produit multiplié par 1000. On n'observe plus la

périodicité dans ce cas et la figure de pôle montre une distribution plus homogène (le maximum des isocontours est proche de 1). Dans ce travail, le nombre des grains et en conséquence le nombre des angles d'Euler n'est pas important, donc la périodicité ne joue pas un rôle sur le tirage. La méthode utilisée donne des bons résultats sur la distribution des orientations cristallographiques. De la même manière, les nombres dont on a besoin pour les centres des particules et les centres des polyèdres des Voronoï sont limités et cette méthode peut être utilisée.

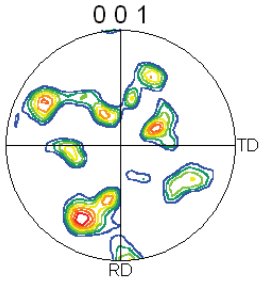




max=1.85

(a) (b)

Figure A. 3 : (a) Orientations cristalline avec la méthode de congruence linéaire (b) Figure de pôle associé à ces orientations



max=1.07

Figure A. 4 : (a) Orientations cristallines avec la méthode de congruence linéaire modifiée pour la périodicité (b) Figure de pôle associé à ces orientations

ANNEXE B

SYSTEME DE GLISSMENT DU FE C.C.

Il existe 24 systèmes de glissement pour les métaux de structure cubique centrée (C.C.). Les systèmes de glissement des familles {110}<111> et {112}<111> des métaux C.C. sont présentés dans le tableau B.1

N°	Plan de glissement	Direction de glissement	N°	Plan de glissement	Direction de glissement
1	$(0\bar{1}1)$	$[\bar{1}11]$	13	(011)	$[\bar{1}\bar{1}1]$
2	(101)	$[\bar{1}11]$	14	(101)	$[\bar{1}\bar{1}1]$
3	(110)	$[\bar{1}11]$	15	$(\bar{1}10)$	$[\bar{1}\bar{1}1]$
4	$(\bar{2}\bar{1}\bar{1})$	$[\bar{1}11]$	16	$(\bar{2}1\bar{1})$	$[\bar{1}\bar{1}1]$
5	$(12\bar{1})$	$[\bar{1}11]$	17	$(1\bar{2}\bar{1})$	$[\bar{1}\bar{1}1]$
6	$(1\bar{1}2)$	$[\bar{1}11]$	18	(112)	$[\bar{1}\bar{1}1]$
7	$(0\bar{1}1)$	$[111]$	19	(001)	$[1\bar{1}1]$
8	$(\bar{1}01)$	$[111]$	20	$(\bar{1}01)$	$[1\bar{1}1]$
9	$(\bar{1}10)$	$[111]$	21	(110)	$[1\bar{1}1]$
10	$(2\bar{1}\bar{1})$	$[111]$	22	$(21\bar{1})$	$[1\bar{1}1]$
11	$(\bar{1}2\bar{1})$	$[111]$	23	$(\bar{1}\bar{2}\bar{1})$	$[1\bar{1}1]$
12	$(\bar{1}\bar{1}2)$	$[111]$	24	$(\bar{1}12)$	$[1\bar{1}1]$

Tableau B. 1 : Plans et direction de glissement pour les métaux de structure cubique centrée (C.C.)

ANNEXE C

TRAITEMENTS THERMIQUES

Plusieurs traitements thermiques sont effectués sur l'acier ferrito-perlitique C35R présenté au chapitre III, afin obtenir une microstructure avec des grains ferritiques et la cémentite sous forme de particules sphériques. Les micrographies présentées dans la suite sont obtenues en microscopie optique après polissage et attaque au nital 1%.

Dans un premier temps, la température à été maintenue sur le palier A1 correspondant à 727°C pendant 24h et la pièce a été refroidie dans le four éteint (Figure C. 1).

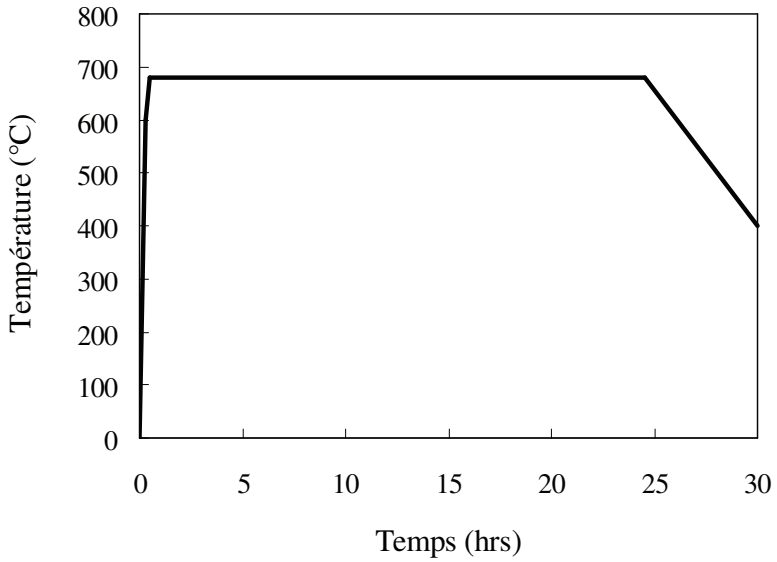


Figure C. 1 : Evolution de la température en fonction du temps pour le premier traitement

La microstructure obtenue par ce traitement thermique est présentée en Figure C. 2. On peut constater que la perlite devient globulaire, mais les carbures sont en amas.

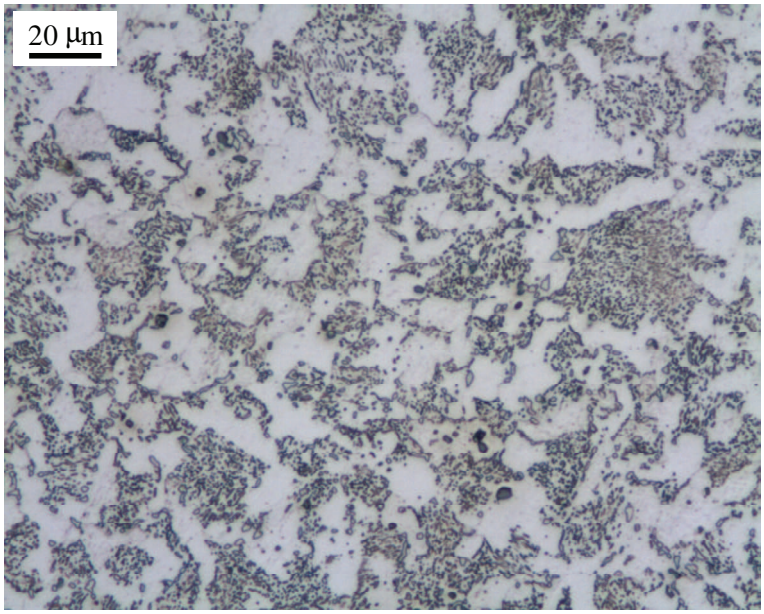


Figure C. 2 : Microstructure de l'acier étudié après le traitement thermique (700°C pendant 24h)

Le deuxième essai a consisté à maintenir la température pendant 2 heures à 750°C (dissolution de la perlite) et 2 heures à 680°C avec un refroidissement lent pour atteindre à la température ambiante. La micrographie (figure C.3) montre une faible globularisation de la perlite.

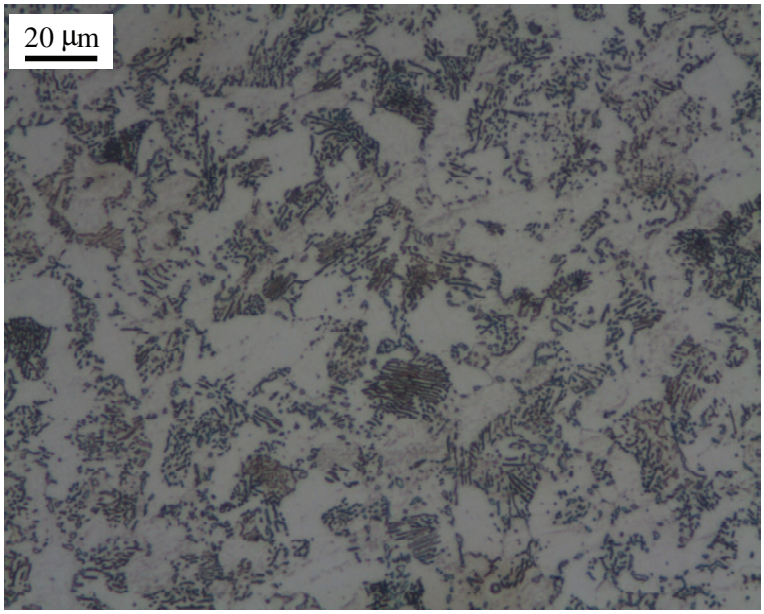


Figure C. 3 : Microstructure de l'acier étudié après 2 heures à 750°C et 2 heures à 680°C

Une autre approche est choisie en faisant varier la température autour de palier A1 entre 680 et 750°C. La Figure C. 4 montre certains cas testés. L'objectif est d'enchaîner les phases de dissolution –précipitation de la cémentite. Dans les cas a, b est d la température est maintenue à 680°C pendant au moins 15 heures.

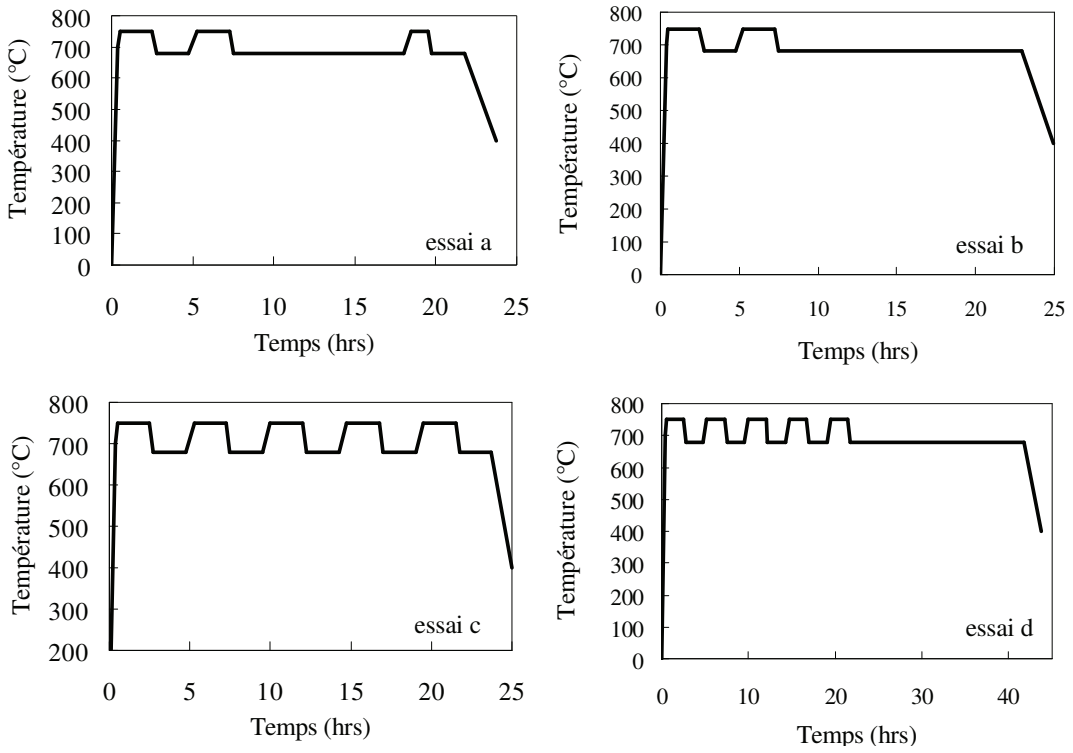


Figure C. 4 : Evolution de la température en fonction du temps

Les cas c et d donnent les meilleurs résultats. Dans le cas d les carbures sont répartis dans la matrice et sont sphéroïdisés. Le traitement retenu est celui d'essais d. Cela donne le meilleur résultat de sphéroïdisation des carbures. Cette méthode peut être utilisée avec des fours de faible inertie thermique. Donc ce traitement n'est pas pu être réalisé sur le bloc utilisé dans ce travail à cause de sa grande taille qui a conduit à l'utilisation d'un grand four. Par conséquent un autre type de traitement a finalement été effectué. Ceci est expliqué dans le chapitre III.

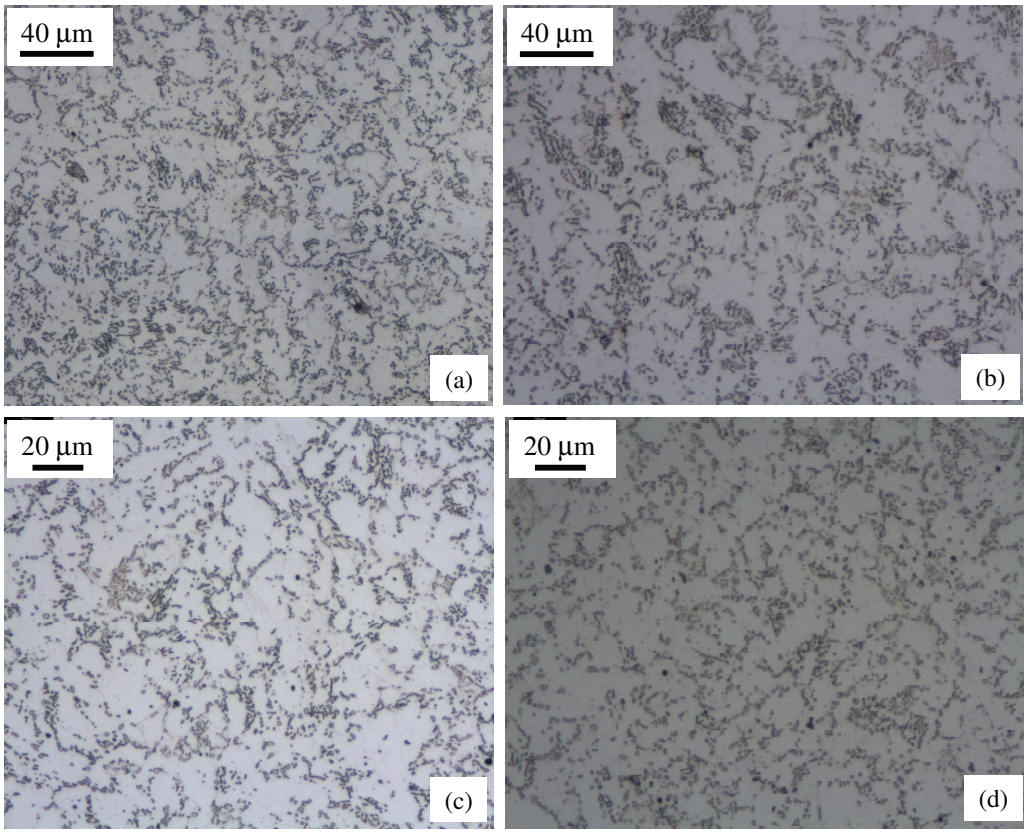


Figure C. 5 : Microstructure de l'acier étudié après différents traitements thermiques présentés à la figure C.4

ANNEXE D

MONTAGE DE TRACTION A FROID

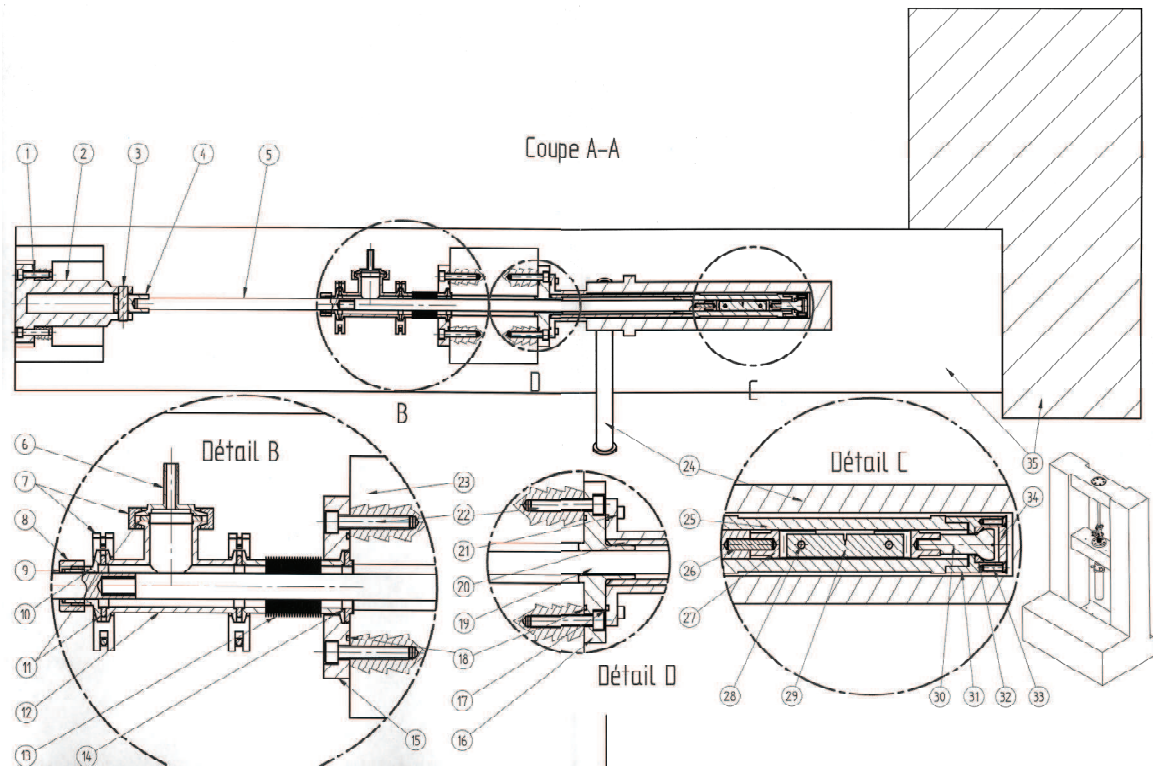


Figure D. 1 : Schéma du montage de la ligne de traction

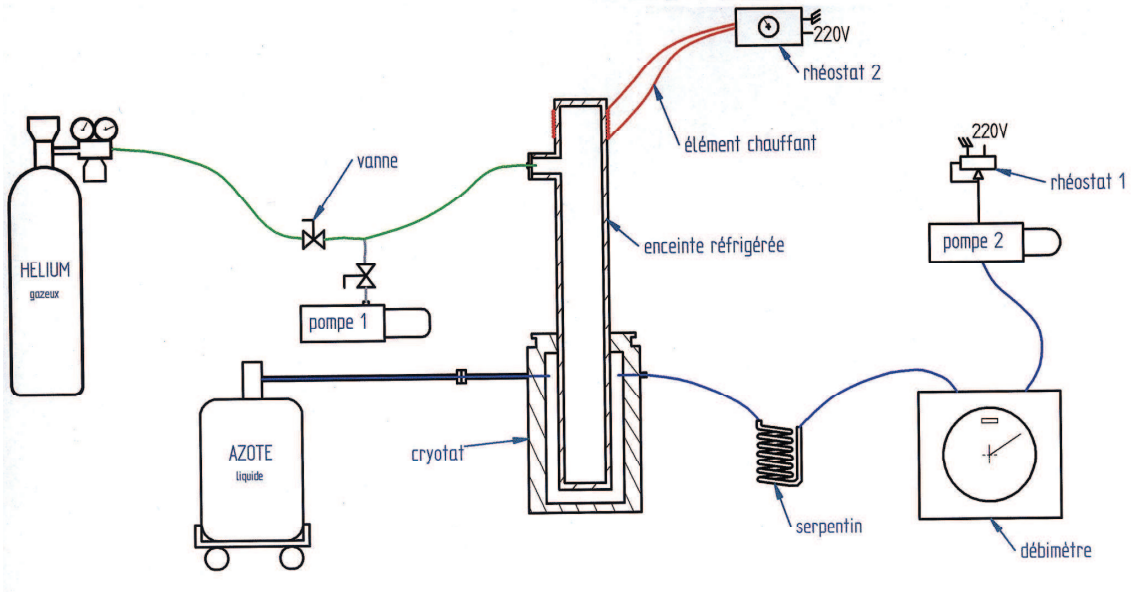


Figure D. 2 : Schéma de principe du cryostat

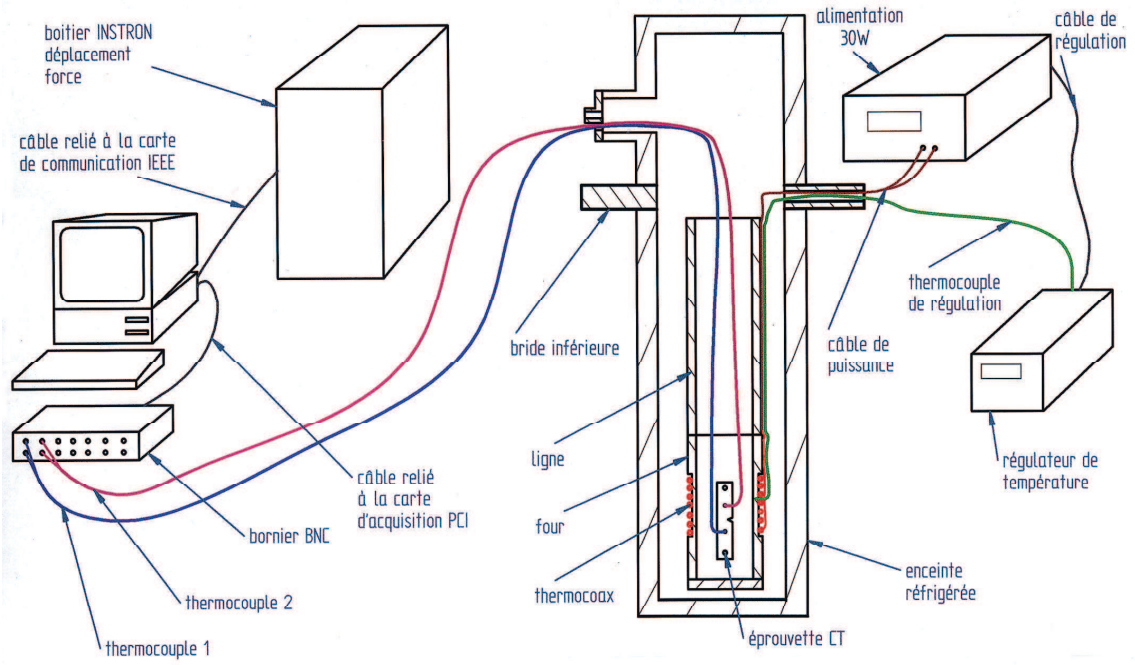


Figure D. 3 : Schéma de principe du dispositif de régulation de la température

Figure D. 4 : Ensemble du montage de traction a froid

ANNEXE E

EFFET DES PARAMETRES DU MODELE CRISTALLIN SUR LA DISTRIBUTION DES CONTRAINTES MOYENNES DES CARBURES

Cette annexe a pour objet l'étude de l'influence des paramètres de l'évolution des densités de dislocations dans le modèle cristallin sur le comportement macroscopique et sur la distribution de contraintes dans les carbures. Plusieurs calculs sont réalisés sur un agrégat de forme cubique afin de simuler les courbes contrainte-déformation rationnelles correspondant à chaque jeu de paramètres du modèle cristallin. Cet agrégat est le même que celui utilisé dans le chapitre IV pour l'identification des paramètres.

Dans un premier temps, on fait l'hypothèse simplifiée que la température n'a pas d'influence sur les paramètres d'écrouissage : la température fait varier la limite d'élasticité et la loi d'écoulement viscoplastique n'est pas modifiée. En conservant les autres paramètres du travail de Erieau et Rey (2004) sur l'acier IF, les calculs aux basses températures sont réalisés en variant seulement le paramètre τ_0. Les valeurs de la limite d'élasticité et donc les valeurs de τ_0 sont tirées du travail de McMahon et Cohen (1965). Les comportements globaux du matériau obtenus par les calculs éléments finis, sont présentés à l'aide loi de Hollomon (Tableau E.2).

Température	K(MPa)	n_H
20°C	497	0,33
-40°C	497	0,26
-80°C	522	0,18
-120°C	580	0,13
-150°C	602	0,12
-196°C	661	0,09

Tableau E.2 : Paramètres du matériau identifié par la loi de Hollomon ($\sigma=K.\varepsilon^n$) avec les simulations sur un agrégat de forme cubique

Une chute de l'exposant d'écrouissage n est mise en évidence. On fait l'hypothèse que seule la limite d'élasticité du matériau est influencée par la température. Donc l'objectif est d'identifier des jeux de

paramètres de l'évolution des densités des dislocations afin d'avoir un écrouissage constant à toutes les températures. Le coefficient d'écrouissage à -40°C est choisi comme le coefficient de référence. Le coefficient à 20°C n'est pas choisi car on est plutôt intéressé aux comportements aux basses températures. L'évolution des densités des dislocations est reliée au libre parcours moyen des dislocations (la distance parcourue en moyenne par une dislocation avant d'être immobilisée) et la distance caractéristique d'annihilation de dislocations, g_c. Le libre parcours moyen est relié lui-même à la densité de dislocations en introduisant un paramètre de matériau K (Réf. Chapitre IV).

On utilise la même méthode que celle du chapitre IV pour identifier les paramètres K et g_c en fonction de la température. On rappelle que le paramètre $g_c(T)$ diminue avec la température à cause de sa nature thermiquement activée. Donc la valeur de g_c est fixée à 0nm -196°C (Libert, 2007et à 8nm à -40°C. Les simulations sur l'agrégat de 512 orientations sont effectuées aux températures -80°C, -120°C, -150°C et -196°C avec différentes valeurs de g_c variante entre 8nm et 0nm. Les courbes macroscopiques de contrainte-déformation de traction sont présentées sur la Figure E. 1.

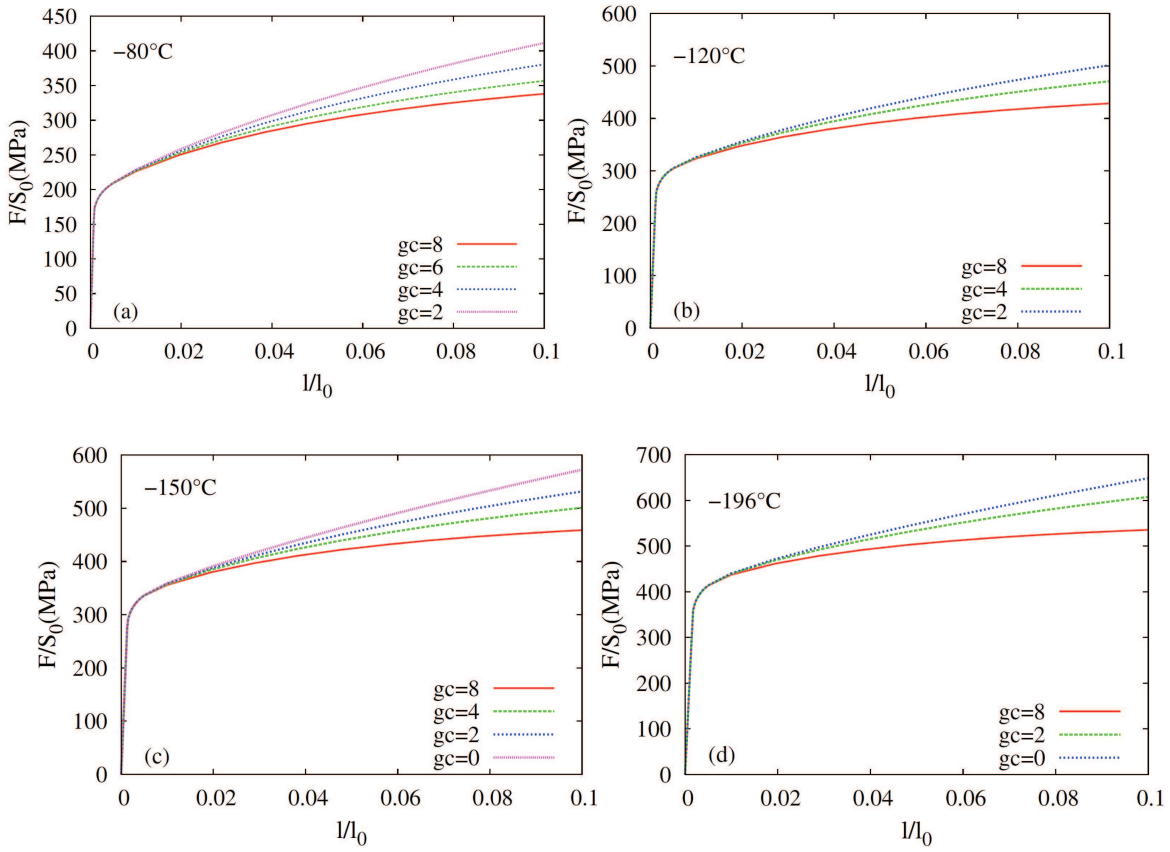


Figure E. 1: Courbes macroscopiques de contrainte-déformation pour différentes valeur de g_c à -80°C(a) -120°C(b) -150°C(c) et -196°C(d)

Afin de choisir la valeur de g_c correspondante au coefficient de l'écrouissage n=0,26 dans la loi de comportement du matériau identifiée à l'aide de loi Hollomon ($\sigma=K.\varepsilon^n$), les valeurs de n sont calculées pour chaque cas (Tableau E.3).

Température	g_c(nm)	n_H
-80°C	8	0,18
	6	0,22
	4	0,26
	2	0,31
-120°C	8	0,13
	4	0,18
	2	0,24
-150°C	8	0,12
	4	0,17
	2	0,21
	0	0,26
-196°C	8	0,09
	2	0,17
	0	0,22

Tableau E.3 : Exposant d'écrouissage *n* correspondant aux différents g_c aux différentes températures

Considérant les résultas obtenus, pour le coefficient d'écrouissage égal à 0,26, les paramètres g_c sont identifiés à 4nm, 2nm, 1nm et 0nm pour les température -80°C, -120°C, -150°C et -196°C respectivement.

La mobilité des dislocations diminue avec la température. Cela peut être introduit dans le modèle cristallin par l'intermédiaire du paramètre *K*. L'évolution des densités de dislocations est inversement proportionnelle à *K* et par conséquent, en augmentant *K*, le niveau d'écrouissage diminue (Réf. chapitre IV). Cela n'est pas favorable dans notre cas, car l'objectif est d'augmenter le coefficient d'écrouissage en diminuant la température pour avoir le même coefficient pour toutes les températures (niveau d'écrouissage constant pour toutes les températures). L'exposant d'écrouissage n=0,22 obtenu à -196°C avec g_c=0nm. On atteint la valeur minimale de g_c et donc le coefficient d'écrouissage ne peut pas dépasser la valeur de 0,22 : on ne peut pas augmenter la valeur de *K*, car une valeur plus grande diminue le niveau de l'écrouissage.

Afin de pouvoir étudier l'effet du paramètre *K* sur le comportement macroscopique et sur la dispersion des contraintes dans les carbures, on fixe la valeur du coefficient d'écrouissage à 0,17. Ceci nous permet d'augmenter la valeur de *K* en prenant la valeur minimale de g_c=0nm. Les simulations réalisées sur l'agrégat cubique montre que les couples (g_c=0, K=50) ou (g_c=2, K=41) ou (g_c=4, K=28) nous mènent au même n=0,17.

L'effet de la taille de grain peut être introduit dans le modèle cristallin par intermédiaire du paramètre *D* (Réf. chapitre IV). La valeur initiale de *D* de 75µm. On peut augmenter le niveau de l'écrouissage en diminuant le paramètre *D*. le paramètre *D* est fixé à 25µm et plusieurs simulations sont effectuées pour identifier les autres paramètres de g_c, *K*. Les paramètres (g_c=2, K=55, D=25) donne une courbe macroscopique de contrainte-déformation avec le coefficient d'écrouissage n=0,17 ($\sigma=K.\varepsilon^n$). Les courbes macroscopiques de contrainte-déformation pour différents jeux de paramètres sont présentées à la Figure E. 2.

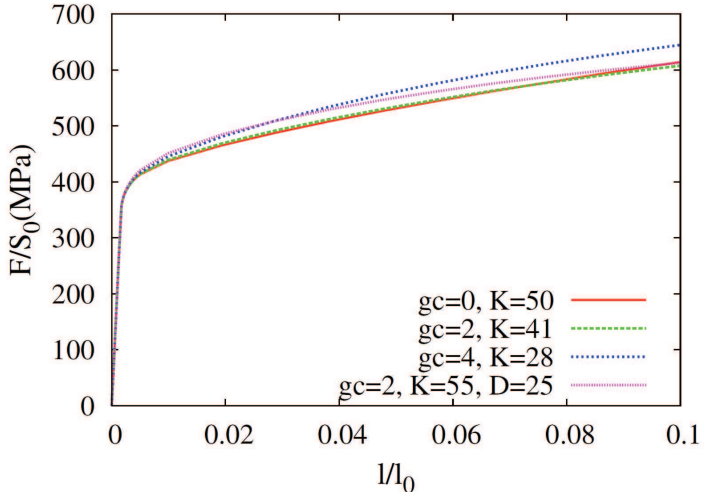


Figure E. 2 : Courbes macroscopiques de contrainte-déformation pour différentes valeurs de g_c, K et D à -196°C (D=75µm si sa valeur n'est pas indiquée)

Dans le cas (g_c=4, K=28, D=75) et (g_c=2, K=55, D=25), les courbes de contrainte-déformation se séparent plus vite dès d'écoulement plastique. Mais dans le cas (g_c=4, K=28, D=75), la pente d'écrouissage reste identique par rapport aux autres courbes. En revanche dans le cas de (g_c=2, K=55, D=25), l'écrouissage diminue en fonction de la déformation.

Les paramètres identifiés, sont utilisés pour calculer les contraintes dans les carbures en utilisant la microstructure avec les grains hexagonaux et les carbures ronds (Réf. Chapitre IV). Quatre calculs est réalisés. Les courbes macroscopiques de contrainte-déformation suivent la même allure observée sur la Figure E. 1. Par contre, dans le cas de (g_c=0, K=50, D=75), il y a une légère augmentation de l'écrouissage à partir de 8% de déformation (Figure E. 3). Les niveaux de contraintes sont plus importants en présence des carbures élastiques.

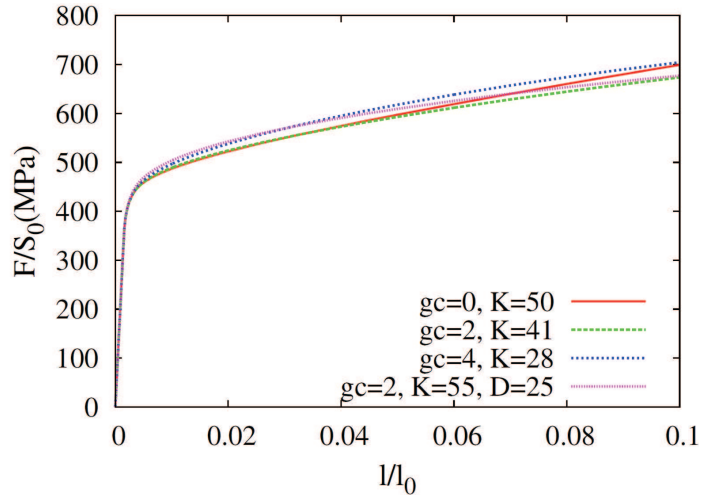


Figure E. 3: Courbes macroscopique de contrainte déformation pour différentes valeur de g_c, K et D à -196°C, en présence des carbures (D=75µm si sa valeur n'est pas indiquée)

Les distributions cumulées des contraintes moyennes des carbures, sont calculées pour les différents cas et sont présentées sur la Figure E. 4 :

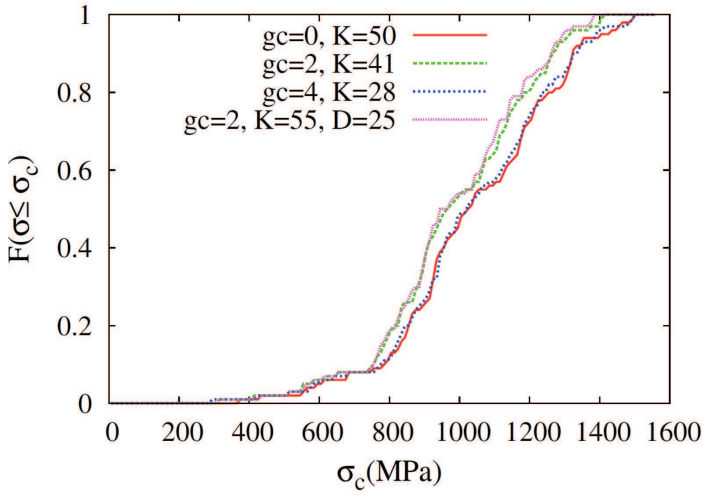


Figure E. 4: Comparaison des distributions cumulées des contraintes obtenues avec différents paramètres d'écrouissage (*D*=75µm si sa valeur n'est pas indiquée) à la fin du chargement

Les quatre distributions montrent la même évolution aux différents niveaux de déformation. La petite différence entre les distributions est due à la différence dans les comportements macroscopiques. On peut conclure que si les différents paramètres de l'évolution des densités de dislocations conduisent au même comportement macroscopique de l'agrégat, la distribution des contraintes moyennes dans les carbures reste identique : n'y a pas influence des paramètres g_c, K et D sur la distribution des contraintes dans les carbures.

ANNEXE F

SIMULATION 3D DE MICROSTRUCTURE

La microstructure de l'acier étudié est constituée par les grains de ferrite et les particules sphériques de carbures. Un agrégat tridimensionnel est créé comportant des grains polyédriques à l'aide de la partition de Voronoï et des particules sphériques. Cet agrégat a pu être obtenu par une collaboration avec Serge Pascal du CEA (Commissariat à l'énergie Atomique). Le modèle éléments finis de cet agrégat est crée en utilisant le code Castem développé au CEA et les outils développés dans le cadre de la thèse de F. Di Paola.

La fraction volumique de carbure est de 0,01 et le ratio entre la taille de grain et la taille de particule est fixé à 5 comme dans la géométrie bidimensionnelle. Le nombre des grains et des carbures dans l'agrégat sont de 117 et 104 respectivement. La distribution des orientations des grains est définie en utilisant un tirage de nombres pseudo-aléatoire. Le maillage de l'agrégat est converti sous le format Abaqus afin de pouvoir lancer les simulations 3D en utilisant le modèle cristallin implémenté dans Abaqus. Les éléments utilisés sont de type C3D4. Le nombre d'éléments dans le modèle élément finis est de 2 384 399. La Figure F. 1 montre les grains maillés dans l'agrégat 3D. Les centres des particules sphériques sont tirés aléatoirement après la création des grains. Le maillage des grains est modifié après le maillage des particules. La Figure F. 2 montre les particules maillées au sein de la microstructure. La modification du maillage des grains peut être observée sur la Figure F. 3. On a mis une distance minimale entre les carbures et les faces du cube pour éviter les problèmes de maillage.

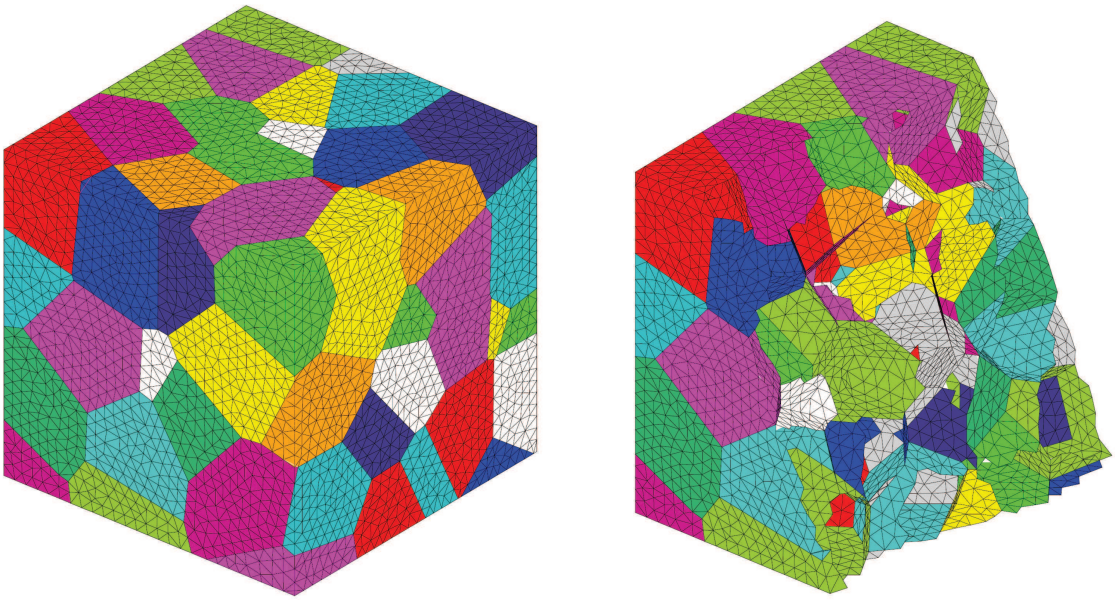


Figure F. 1 : Maillage des grains dans l'agrégat tridimensionnel

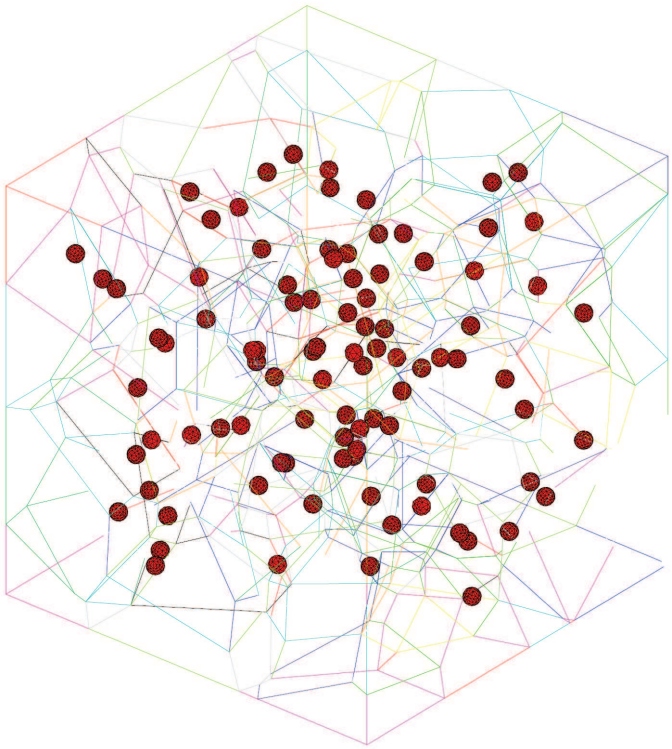


Figure F. 2 : Carbures maillés au sein de la microstructure

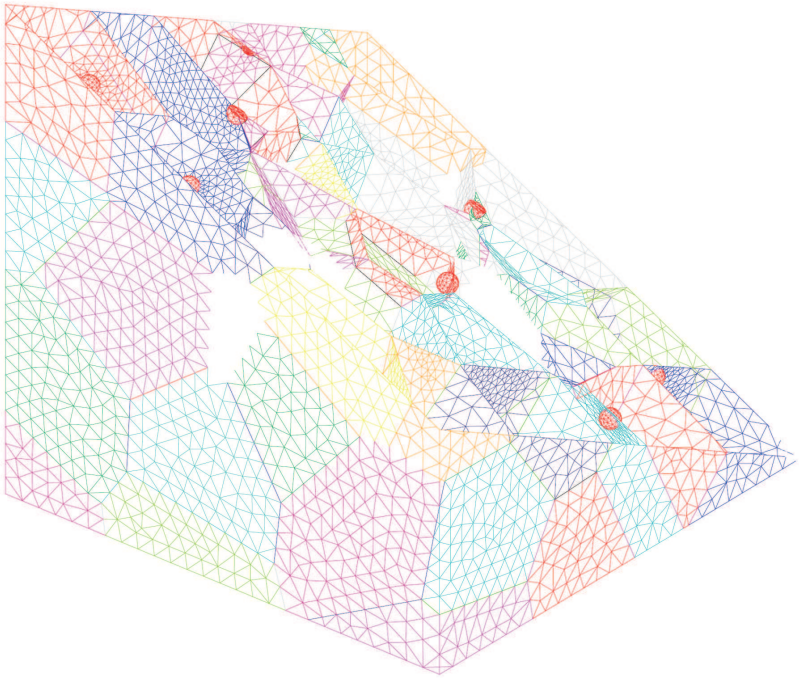
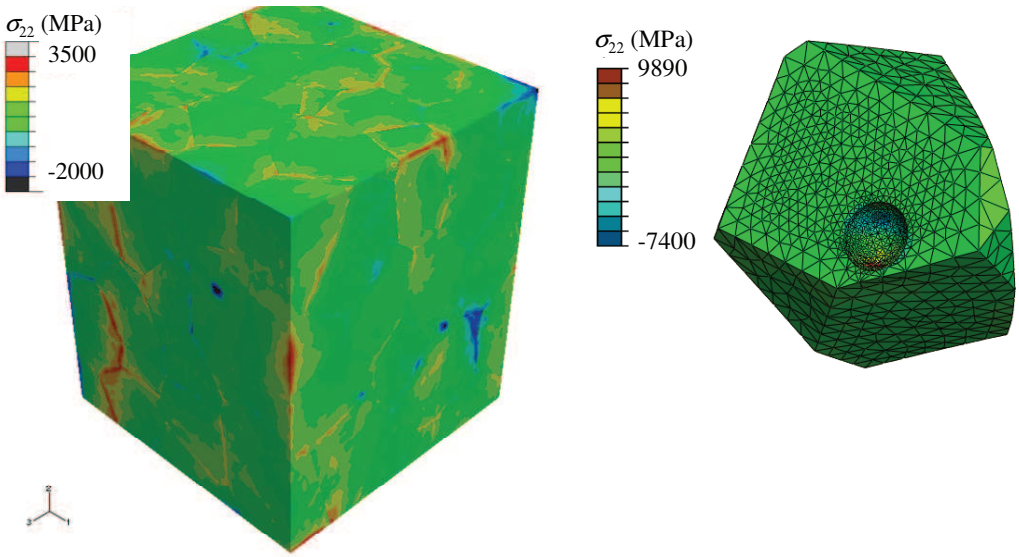


Figure F. 3 : Maillage modifié aux interfaces grains/carbures

La simulation éléments finis est réalisée pour un comportement correspondant à la température de -196°C. Les résultats de la simulation montrent des contraintes très élevées dans les grains ainsi que dans les carbures. La concentration de contrainte se situe aux joints grains (Figure F. 4(a)) et aux interfaces grains/carbures (Figure F. 4(b)). Les valeurs moyennes des contraintes dans les carbures sont très élevées en comparant avec les calculs 2D (Figure F. 5). Cela est lié au choix des éléments de type C3D4.



(a) (b)

Figure F. 4 : Champs des contraintes (a) microstructure (b) interfaces grains/carbures

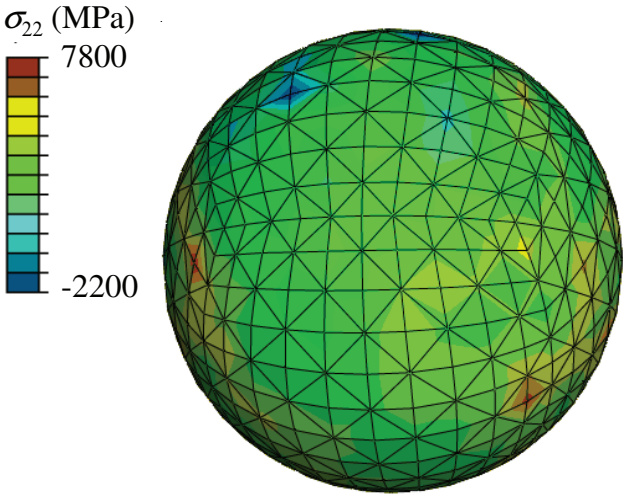


Figure F. 5 : Champs des contraintes d'un carbure

La distribution cumulée des contraintes dans les carbures après 11% de déformation plastique équivalente moyenne à -196°C est présentée sur la Figure F. 6. Les valeurs minimale et maximale des contraintes moyennes sont 1915 et 4100 MPa. Ces valeurs sont quasiment deux fois plus élevées que dans les simulations 2D. Ces valeurs très élevées sont dues à l'utilisation d'éléments linéaire à 4 nœuds. Il faudra modifier le type d'éléments, ce qui représente un nouveau travail.

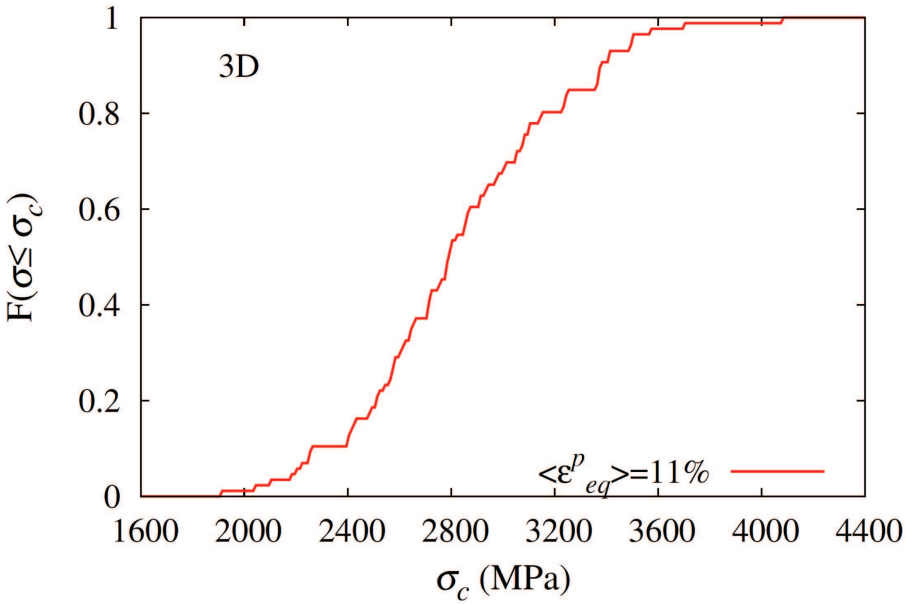


Figure F. 6 : Distributions cumulées des contraintes dans les carbures à 0.11% de la déformation plastique équivalente moyenne à la température de -196°C