



HAL
open science

**Modélisation polycristalline du comportement
élasto-viscoplastique des aciers inoxydables austénitiques
316L(N) sur une large gamme de chargements :
application à l'étude du comportement cyclique à
température élevée**

Diogo Goncalves

► **To cite this version:**

Diogo Goncalves. Modélisation polycristalline du comportement élasto-viscoplastique des aciers inoxydables austénitiques 316L(N) sur une large gamme de chargements : application à l'étude du comportement cyclique à température élevée. Mécanique des solides [physics.class-ph]. Sorbonne Université, 2018. Français. NNT : 2018SORUS089 . tel-02325387

HAL Id: tel-02325387

<https://theses.hal.science/tel-02325387v1>

Submitted on 22 Oct 2019

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.

Sorbonne Université

Ecole doctorale Science mécanique, acoustique, électronique & robotique

CEA CADARACHE - DEN/CAD/DER/SESI/LCOS

**Modélisation polycristalline du comportement élasto-
viscoplastique des aciers inoxydables austénitiques 316L(N)
sur une large gamme de chargements : application à l'étude
du comportement cyclique à température élevée**

Par Diogo GONÇALVES

Thèse de doctorat de l'Université Pierre et Marie Curie

Dirigée par Maxime SAUZAY et encadrée par Pierre LAMAGNÈRE

Présentée et soutenue publiquement le 22 mai 2018

Devant un jury composé de :

M. Fionn DUNNE, Professeur, Imperial College	Rapporteur
M. Sébastien MERCIER, Professeur, Université de Lorraine	Rapporteur
M. Luc RÉMY, Professeur, Mines ParisTech	Examinateur
Mme Véronique FAVIER, Professeur, Arts et Métiers ParisTech	Examinatrice
M. Renald BRENNER, Directeur de Recherche, UPMC	Examinateur
M. Pierre LAMAGNÈRE, Ingénieur de Recherche, CEA	Examinateur
M. Maxime SAUZAY, Chercheur, HDR UPMC/CEA	Examinateur

“Eu quase que nada não sei. Mas desconfio de muita coisa.”
O Grande Sertão Veredas, Guimarães Rosa

Sommaire

SOMMAIRE.....	4
LISTE DES NOTATIONS – LIST OF NOTATIONS	8
LISTE DES ABREVIATIONS - LIST OF ABBREVIATIONS	13
INTRODUCTION.....	I
a. Contexte industriel.....	I
b. Comportement de l'acier 316L(N)	II
c. La modélisation du comportement mécanique	III
d. Objectifs de la thèse et plan du rapport de thèse	IV
1 CARACTERISATION MACROSCOPIQUE ET MICROSCOPIQUE DU COMPORTEMENT MECANIQUE DE L'ACIER 316L(N) LORS DES CHARGEMENTS CYCLIQUES.....	20
1.1 Introduction.....	21
1.2 Présentation de l'acier 316L(N).....	21
1.3 Les mécanismes de déformation plastique des métaux et alliages CFC.....	23
1.3.1 Interactions entre dislocations.....	26
1.3.2 Le vieillissement dynamique (DSA).....	27
1.4 Comportement mécanique de l'acier 316L(N)	30
1.4.1 Comportement en traction monotone.....	30
1.4.2 Effet Bauschinger	35
1.4.3 Comportement en sollicitation de déformation cyclique	37
1.4.3.1 Evolution de l'amplitude de contrainte en fonction du nombre de cycles	37
1.4.3.2 Evolution des structures de dislocations en fonction du nombre de cycles.....	39
1.4.3.3 Effet de la vitesse de chargement sur la microstructure de dislocations.....	42
1.4.4 Comportement de rochet uniaxial	42
1.4.5 Effet du temps de maintien en fatigue-fluage et fatigue-relaxation.....	47
1.5 Conclusion	49
2 ASSESSMENT OF ELASTIC-VISCOPLASTICITY MEAN-FIELD HOMOGENIZATION RULES APPLIED TO FCC POLYCRYSTALS	

2.1.	Introduction.....	53
2.2.	Model description.....	55
2.2.1.	Stress localization rules.....	55
2.2.2.	Crystal viscoplasticity laws.....	56
2.2.2.1.	Crystal viscoplastic flow law.....	56
2.2.2.2.	Crystal hardening laws.....	57
2.2.3.	Convergence with respect to numerical modeling.....	57
2.2.3.1.	Mean-field homogenization.....	57
2.2.3.2.	Full-field finite elements computations.....	58
2.3.	Assessment of self-consistent models under tensile loading.....	59
2.3.1.	Material parameters and tensile loading conditions.....	60
2.3.2.	Tensile tests.....	61
2.3.2.1.	Rate-insensitive limit.....	61
2.3.2.2.	Strain rate effects during tensile loading.....	62
2.3.2.1.	Average grains distributions under tensile loading.....	65
2.3.2.1.1.	Average grain viscoplastic equivalent strain.....	65
2.3.2.1.2.	Average grain stress.....	67
2.3.3.	Relaxation tests.....	69
2.3.3.1.	Stress relaxation curves.....	69
2.3.3.2.	Relaxation at the grain scale.....	70
2.3.4.	Creep tests.....	71
2.4.	Assessment of self-consistent models under cyclic loading.....	73
2.4.1.	Material parameters and cyclic loading conditions.....	73
2.4.2.	Bauschinger effect.....	75
2.4.3.	Cyclic stress-strain-curves and hysteresis loops.....	77
2.4.4.	Ratcheting.....	78
2.5.	Discussion.....	81
2.5.1.	Tensile loading.....	81
2.5.2.	Elastic inclusion in a creep-deforming matrix.....	82
2.5.3.	Cyclic loading.....	84
2.6.	Conclusions.....	85

3 A DISLOCATION-BASED VISCOPLASTIC MODEL APPLIED TO THE PREDICTION OF THE MECHANICAL BEHAVIOR OF 316L(N) SS AT ROOM TEMPERATURE..... 87

3.1	Introduction.....	88
3.2	Dislocation-based viscoplastic model.....	90
3.2.1	Face-centered cubic (FCC) general behavior.....	90
3.2.2	Constitutive laws.....	91
3.2.2.1	Mechanism of multiplication of dislocations.....	94
3.2.2.2	Mechanism of annihilation of dislocations.....	96
3.2.2.2.1	Annihilation of edge dislocations.....	96

3.2.2.2	Annihilation of screw dislocations.....	97
3.2.2.3	Mechanism of production and annihilation of dipoles.....	97
3.2.2.4	Self-consistent model	99
3.3	Determination of material parameters and adjustment of the viscoplasticity parameters.....	99
3.3.1	Set of experimental data	99
3.3.2	Determination of material parameters.....	100
3.3.3	Adjustment of the mean free-path parameters	101
3.3.3.1	Partition of the standard triangle in two families.....	102
3.3.4	Adjustment of the crystalline viscoplasticity parameters.....	103
3.4	Validation of the proposed model.....	105
3.4.1	Dislocation density under tensile loading.....	105
3.4.2	Relaxation tests.....	105
3.4.3	Cyclic deformation	106
3.4.4	Ratcheting.....	108
3.4.5	Sensitivity analysis with respect to material parameters	114
3.4.5.1	Initial dislocation density	114
3.4.5.2	Critical dislocation annihilation distances	115
3.4.5.3	Mean free-path parameters.....	117
3.5	Discussion	120
3.5.1	Cyclic hardening/softening behavior	120
3.5.2	Robustness of the proposed model.....	121
3.5.3	Comparison with the prediction of other polycrystal models.....	121
3.5.4	Number of active slip systems	125
3.6	Conclusions	125
4	PERFECTIONNEMENT DU MODELE DE COMPORTEMENT DES POLYCRISTAUX CFC A TEMPERATURE AMBIANTE.....	127
4.1	Introduction.....	128
4.2	Prise en compte de l'interaction entre les systèmes de glissement dans l'évolution de la densité de dislocations	131
4.2.1	Modification du modèle pour prendre en compte les interactions entre systèmes de glissement.....	132
4.2.1.1	Identification des paramètres d'interaction.....	133
4.2.1.2	Effet de l'énergie de faute d'empilement.....	135
4.2.1.3	Effet de la température	137
4.2.2	Prédiction de la partition du triangle standard dans le cas de l'acier 316L(N)	138
4.2.3	Prédiction de l'effet Hall-Petch	139
4.2.4	Impact de la modification sur les prédictions du modèle à température ambiante.....	140
4.2.4.1	Modélisation du comportement en déformation cyclique	142
4.2.4.2	Modélisation du comportement en déformation progressive.....	142
4.2.4.3	Cas des chargements multiaxiaux.....	143

4.3	Prise en compte de la localisation de la déformation plastique	145
4.3.1	Description des modèles à bande de glissement	147
4.3.1.1	Modèle à distance inter-bandes constante.....	147
4.3.1.2	Modèle avec multiplication des bandes.....	148
4.3.2	Application du modèle à l'étude du comportement en traction des polycristaux CFC	149
4.3.2.1	Cas des métaux à distance interbande <i>dGB</i> constante.....	150
4.3.2.2	Cas des métaux à <i>DBG</i> variable.....	154
4.3.2.3	Prédiction de l'effet Hall-Petch.....	155
4.4	Conclusion	158
5	MODELISATION DU COMPORTEMENT ELASTO-VISCOPLASTIQUE DE L'ACIER 316L(N) A HAUTE TEMPERATURE.....	161
5.1	Introduction.....	162
5.2	Développement du modèle à température élevée	162
5.2.1	Le vieillissement dynamique.....	162
5.2.2	Prise en compte du glissement dévié et production de boucles prismatiques	167
5.2.3	Développement plus simple des microstructures de dislocations.....	169
5.2.4	Montée des dislocations-coins.....	172
5.3	Récapitulatif du modèle appliqué aux températures élevées	175
5.3.1	Lois cristallines.....	175
5.3.2	Lois de transition d'échelle.....	177
5.4	Détermination des paramètres matériau	177
5.4.1	Paramètres supposés indépendants de la température	177
5.4.2	Paramètres dépendants de la température.....	179
5.4.3	Identification des paramètres de viscoplasticité cristalline et du DSA.....	181
5.5	Validation du modèle.....	185
5.5.1	Relaxation.....	185
5.5.2	Déformation cyclique.....	189
5.5.3	Fatigue-Relaxation.....	196
5.5.4	Essais de symétrisation.....	202
5.5.5	Déformation progressive en traction-torsion (rochet 2D).....	203
5.6	Étude de la sensibilité aux paramètres	207
5.7	Conclusions	210
CONCLUSIONS GENERALES ET PERSPECTIVES.....		213
REFERENCES.....		220

Liste des notations – List of Notations

\mathbf{a}_γ	Paramètre de maille de l'austénite - <i>Mesh parameter of austenite</i>
γ_{SFE}	Energie de faute d'empilement – <i>Stacking fault energy</i>
\mathbf{b}	Norme du vecteur de Burgers – <i>Burgers vector norm</i>
ϕ	Taille moyenne de grain – <i>Mean grain size</i>
K_{HP}	Constante de Hall-Petch – <i>Hall-Petch constant</i>
κ_b	Constante de Boltzmann – <i>Boltzmann constant</i>
ν_D	Fréquence de Debye - <i>Debye's frequency</i>
R	Constante des gaz parfaits – <i>Ideal gas constant</i>
T	Température - <i>Temperature</i>
Q	Energie d'activation – <i>Activation energy</i>
V	Volume d'activation – <i>Activation volume</i>
t	Temps - <i>Time</i>
t_h	Temps de maintien – <i>Holding time</i>
t_{cl}	Temps de montée – <i>Climbing time</i>
t_w	Temps d'attente – <i>Waiting time</i>
t_a	Temps de vieillissement – <i>Aging time</i>
δ_0	Temps caractéristique associé à la diffusion du Chrome - <i>Characteristic time associated with Chrome diffusion</i>
a	Coefficient d'anisotropie élastique - <i>Elastic anisotropy coefficient</i>
$\mathbf{C}_{11}, \mathbf{C}_{12}, \mathbf{C}_{44}$	Coefficients d'élasticité cristalline - <i>Crystalline elasticity coefficients</i>
\mathbf{Y}	Module d'Young - <i>Young's modulus</i>
μ	Module de cisaillement – <i>Shear modulus</i>
ν	Coefficient de Poisson – <i>Poisson's ratio</i>
f	Facteur de Schmid – <i>Schmid factor</i>
α_l	Angles entre la direction de sollicitation et la direction de glissement - <i>Angles between the loading and the slip directions</i>
α_n	Angles entre la direction de sollicitation et la normale au plan de glissement - <i>Angles between the loading and the normal to the slip plane directions.</i>
$\underline{\mathbf{m}}^i$	Vecteur unitaire dans la direction du glissement i – <i>Unit vector along the slip direction</i>
$\underline{\mathbf{n}}^i$	Vecteur unitaire normal au plan de glissement i – <i>Unit normal vector perpendicular to the slip plane</i>
σ	Contrainte à l'échelle du cristal – <i>Stress at the crystal scale</i>
Σ	Contrainte à l'échelle du polycristal - <i>Stress at the polycrystal scale</i>
σ^d	Contrainte déviatorique à l'échelle du cristal - <i>Deviatoric stress tensors at the crystal scale</i>
Σ^d	Contrainte déviatorique à l'échelle du polycristal - <i>Deviatoric stress tensors at the polycrystal scale</i>

Σ_{eq}	Contrainte équivalente de von Mises à l'échelle du polycristal – <i>von Mises equivalent stress at the polycrystal scale</i>
Σ_m	Contrainte moyenne – <i>Mean stress</i>
Σ_a	Amplitude de contrainte – <i>Stress amplitude</i>
Σ_{max}	Contrainte maximale – <i>Maximum stress</i>
Σ_{min}	Contrainte minimale – <i>Minimum stress</i>
Σ_{relax}	Contrainte relaxée – <i>Stress relaxation</i>
Σ_y	Limite d'élasticité – <i>Yield strength</i>
Σ_0	Contrainte initiale – <i>Initial tensile stress</i>
Σ_f	Contrainte de friction caractéristique – <i>Characteristic frictional stress</i>
ϵ	Déformation totale à l'échelle du cristal – <i>Total strain at the crystal scale</i>
E, E_{tot}	Déformation totale à l'échelle du polycristal – <i>Total strain at the polycrystal scale</i>
E_0	Déformation totale initiale à l'échelle du polycristal – <i>Total initial strain at the polycrystal scale</i>
E_a	Amplitude de déformation à l'échelle du polycristal – <i>Strain amplitude at the polycrystal scale</i>
$\epsilon^p, \epsilon^{vp}$	Déformation plastique (p) ou viscoplastique (vp) à l'échelle du cristal – <i>Plastic (p) or viscoplastic (vp) strain at the crystal scale</i>
E^p, E^{vp}	Déformation plastique (p) ou viscoplastique (vp) à l'échelle du polycristal – <i>Plastic (p) or viscoplastic (vp) strain at the polycrystal scale</i>
E_a^p, E_a^{vp}	Amplitude de déformation plastique (p) ou viscoplastique (vp) à l'échelle du polycristal – <i>Plastic (p) or viscoplastic (vp) strain amplitude at the polycrystal scale</i>
E_r	Déformation de rochet à l'échelle du polycristal – <i>Ratcheting strain at the polycrystal scale</i>
ϵ_{eq}^{vp}	Déformation viscoplastique équivalente à l'échelle du cristal – <i>Equivalent viscoplastic strain at the crystal scale</i>
E_{eq}^{vp}	Déformation viscoplastique équivalente à l'échelle du polycristal – <i>Equivalent viscoplastic strain at the polycrystal scale</i>
E_{cum}^{vp}	Déformation viscoplastique (vp) cumulée à l'échelle du polycristal – <i>Cumulative viscoplastic strain (vp) at the polycrystal scale</i>
η	Module de linéarisation du comportement viscoplastique macroscopique – <i>Linearized modulus of the macroscopic viscoplastic behavior</i>
N	Nombre de cycles – <i>Number of cycles</i>
γ	Déformation de cisaillement – <i>Shear strain</i>
$\gamma_i^p, \gamma_i^{vp}$	Glissement plastique (p) ou viscoplastique (vp) sur le système i – <i>Plastic (p) or viscoplastic (vp) slip in slip system i</i>
$\gamma_{i,e}^{vp}, \gamma_{i,s}^{vp}$	Glissement viscoplastique des dislocations coins (e) et vis (s) – <i>Viscoplastic slip of edge (e) and screw (s) dislocations</i>
τ^i	Contrainte de cisaillement résolue sur le système de glissement i – <i>Resolved shear stress on the slip system i</i>

τ_{eff}	Contrainte de cisaillement à courte portée ou isotrope à l'échelle microscopique - <i>Short-range or isotropic shear stress at the microscopic scale</i>
R	Contrainte à courte portée ou isotrope à l'échelle macroscopique / rapport numérique - <i>Short-range or isotropic stress at the macroscopic scale / numerical ratio</i>
R_{crit}	Rapport critique – Critical ratio value
τ_0	Contrainte de cisaillement résolue critique initiale – <i>Initial critical resolved shear stress</i>
τ_c	Contrainte de cisaillement résolue critique - <i>Critical resolved shear stress</i>
τ^*	Contrainte visqueuse de cisaillement – <i>Viscous shear stress</i>
$\tau_{primary}$	Contrainte de cisaillement la plus élevée (système primaire) - <i>Highest resolved shear stress (primary slip system)</i>
$\tau_{secondary}$	Deuxième contrainte de cisaillement plus élevée (système secondaire) – <i>Second highest resolved shear stress (secondary slip system)</i>
τ_p	Contrainte locale due à des empilements de dislocations - <i>Local stress due to dislocation pile-up</i>
τ_{cl}	Contrainte appliquée dans le processus de la montée – <i>Stress applied in the dislocation climbing process</i>
τ^{norm}	Contrainte normale au plan de glissement - <i>Normal stress on the slip plane</i>
τ^{elas}	Contrainte d'interaction élastique entre les deux dislocations du dipôle - <i>Elastic interaction stress between the two dislocations of a dipole</i>
x	Contrainte interne à longue portée ou cinématique à l'échelle microscopique - <i>Long-range internal stress or kinematic at the microscopic scale</i>
X	Contrainte interne à longue portée ou cinématique à l'échelle macroscopique - <i>Long-range internal stress or kinematic at the macroscopic scale</i>
Q	Énergie d'activation – <i>Activation energy</i>
V	Volume d'activation – <i>Activation volume</i>
A	Paramètre proportionnel à la densité de dislocations mobiles - <i>Material parameter proportional to the mobile dislocation density</i>
α, C	Coefficients de durcissement pour une loi non-linéaire d'Armstrong-Frederick - <i>Armstrong-Frederick non-linear hardening law coefficients</i>
\bar{M}	Facteur Multiplicatif (Facteur de Taylor) - <i>Multiplicative factor (Taylor Factor)</i>
ρ, ρ_t	Densité de dislocations totale - <i>total dislocations density</i>
ρ_o	Densité de dislocations initiale - <i>initial dislocations density</i>
ρ_e	Densité de dislocations coins - <i>edge dislocations density</i>
ρ_s	Densité de dislocations vis - <i>screw dislocations density</i>
ρ_d	Densité de dipôles-coins - <i>edge-dipoles density</i>
ρ_{PL}	Densité de boucles prismatiques – <i>prismatic loops density</i>
ρ_m	Densité de dislocations mobiles – <i>Mobile dislocation density</i>

ρ_c	Densité de dislocations dans la phase molle – <i>Soft phase dislocation density</i>
ρ_w	Densité de dislocations dans la phase dure – <i>Hard phase dislocation density</i>
$\bar{\alpha}_{mon}$	Coefficient de durcissement pour chargements monotones – <i>Hardening coefficient for monotone loadings</i>
$\bar{\alpha}_{cyc}$	Coefficient de durcissement pour chargements cycliques – <i>Hardening coefficient for cyclic loadings</i>
h_{ij}	Matrice d'écrouissage - <i>Hardening matrix</i>
h_o	Coefficient d'auto-écrouissage - <i>Self-hardening coefficient</i>
h_1, h_{coll}	Coefficient des interactions colinéaires - <i>Coplanar interactions coefficient</i>
h_2, h_{Hirth}	Coefficient des jonctions de Hirth - <i>Hirth lock coefficient</i>
h_3, h_{copla}	Coefficient des interactions coplanaires - <i>Coplanar interactions coefficient</i>
h_4, h_{Gliss}	Coefficient des jonctions glissiles - <i>Glissile junction coefficient</i>
h_5, h_{Lomer}	Coefficient des jonctions de Lomer-Cottrell - <i>Lomer-Cottrell lock coefficient</i>
q	Coefficient de durcissement latent - <i>Latent hardening coefficient</i>
L	Libre-parcours moyen – <i>Mean free-path</i>
y_e, y_s	Distance critique d'annihilation des dislocations coins (e) et vis (s) - Annihilation distances of edge (e) and screw (s) dislocations
h_{max}	Hauteur maximale de stabilité des dipôles-coins - <i>Maximum edge-dipole stable height</i>
h	Hauteur d'un dipôle-coin - <i>Height of a edge-dipole</i>
κ_{single}	Paramètre du libre-parcours moyen des cristaux orientés en glissement simple - <i>Mean free-path parameter of single slip oriented crystals</i>
κ_{multi}	Paramètre du libre-parcours moyen des cristaux orientés en glissement simple - <i>Mean free-path parameter of multiple slip oriented crystals</i>
κ_{self}	Paramètre du libre-parcours moyen pour les auto-interactions - <i>Mean free-path parameter describing self-interactions</i>
κ_{copla}	Paramètre du libre-parcours moyen pour les interactions coplanaires - <i>Mean free-path parameter describing coplanar-interactions</i>
$\kappa_{jonction}$	Paramètre du libre-parcours moyen pour les interactions de type jonction - <i>Mean free-path parameter describing junction interactions</i>
E_{vac}	Energie de formation de lacunes - <i>Vacancy-formation energy</i>
τ_{III}, τ_{int}	Seuil de contrainte pour l'annihilation thermiquement activée des dislocations vis par le glissement dévié - <i>Threshold stress for thermally activated annihilation of screw dislocations though cross-slip</i>
$A_1, A_2, \alpha_1, \alpha_2$	Constantes - <i>Constants</i>
d_0	Largeur des dislocations vis à contrainte nulle - <i>Width of screw dislocations at zero stress</i>
θ	Angle entre les plans primaire et dévié - <i>Angle between the primary and cross-slip planes</i>
L_1, L_2	Longueur et largeur des bandes de glissement - <i>Length and width of slip bands</i>

e_{BG}	Épaisseur des bandes de glissement - <i>Thickness of slip bands</i>
f_{BG}	Fraction de bandes de glissement dans un cristal - <i>Fraction of slip bands in a crystal</i>
d_{BG}	Distance inter-bande - <i>Interband distance</i>
$\gamma_{BG,crit}^p$	Valeur critique de déformation plastique dans une bande de glissement - <i>Critical value of plastic strain accommodation in a slip band</i>
C_{sol}	Concentration effective des atomes de soluté autour de la dislocation - <i>Effective concentration of solute atoms around dislocations</i>
C_{sat}	Concentration de solutés à saturation - <i>Saturation of solute atoms</i>
C_0	Concentration initiale de soluté dans la matrice - <i>Initial solid solution concentration</i>
U_{cr}	Énergie d'interaction entre une dislocation et un atome de soluté de Chrome - <i>Interaction energy between a dislocation and a solute atom of Chromium</i>
D^{Cr}	Coefficient de diffusion du Chrome - <i>Diffusion coefficient of Chrome</i>
D_0^{Cr}	Coefficient de diffusion initial du Chrome - <i>Initial diffusion coefficient of Chrome</i>
Q_Y^{Cr}	Énergie d'activation de diffusion du Chrome - <i>Chrome diffusion activation energy</i>
\bar{v}	Vitesse moyenne de la dislocation - <i>Mean dislocation slip rate</i>
v_{cl}	Vitesse de montée des dislocations - <i>Dislocation climbing rate</i>
$\bar{\lambda}$	Distance moyenne balayée par une dislocation - <i>Mean distance covered by a dislocation</i>
f_{DSA}	Facteur empirique permettant de décrire l'interaction de type dislocation-soluté - <i>Empirical factor describing dislocation-solute-type interactions</i>
ϵ_a	Facteur de taille entre le rayon de l'atome de soluté et l'atome de la matrice - <i>Size factor between the solute atom and the matrix atom radii</i>
K_{sim}	Coefficient de similitude - <i>Similitude coefficient</i>
d_{cell}	Taille moyenne de la structure de dislocations - <i>Mean dislocation cell size</i>
c_j	Densité de crans de dislocations - <i>Density of dislocation jogs</i>
D^{sd}	Autodiffusion des lacunes - <i>Self-diffusion of vacancies</i>
D_0^{sd}	Coefficient de diffusion des lacunes - <i>Diffusion coefficient of vacancies</i>
Q^{sd}	Energie d'auto-diffusion - <i>Auto-diffusion energy</i>

Liste des abréviations - List of abbreviations

RNR-Na /SFR	Réacteur à Neutron Rapide refroidi au sodium – <i>Sodium-cooled Fast Reactor</i>
REP/PWR	Réacteurs à Eau Pressurisée - <i>Pressurized Water Reactors</i>
EPR	Réacteur pressurisé européen - <i>European Pressurized Reactor</i>
ASTRID	Advanced Sodium Technological Reactor for Industrial Demonstration
VER	Volume élémentaire représentatif - <i>Representative elementary volume</i>
CFC/FCC	Structure cubique à faces centrées – <i>Face centered cubic structure</i>
CC/BC	Structure cubique centrée – <i>Body centered cubic structure</i>
RCC-MR_x	Règles de conception et de construction des matériels mécaniques des installations nucléaires hautes températures - <i>Design and Construction Rules for Mechanical Components of high-temperature nuclear installations</i>
SS	Acier inoxydable - <i>Stainless steel</i>
PLC	Effet Portevin–Le Chatelier- Portevin–Le Chatelier effect
DSA	Vieillessement dynamique - <i>Dynamic Strain Ageing</i>
DSA1	Premier régime du DSA (523K à 723K) – <i>First DSA domain (523K to 723K)</i>
DSA2	Deuxième régime du DSA (723K à 873K) – <i>Second DSA domain (723K to 873K)</i>
BG	Bandes de glissement – <i>Slip bands</i>
BGP/PSB	Bandes de glissement persistantes - <i>Persistent slip bands</i>
MEB/SEM	Microscopie électronique à balayage - <i>Scanning electron microscopy</i>
EBSD	Diffraction d'électrons rétrodiffusés - <i>Electron backscatter diffraction</i>
MET/TEM	Microscopie électronique en transmission - <i>Transmission electron microscopy</i>
EF/FE	Eléments-finis – <i>Finite elements</i>
FFT	Transformation de Fourier rapide - <i>Fast Fourier Transform</i>
CUB8	Éléments cubiques linéaires - <i>Linear cubic elements</i>
SD	Écart-type standard - <i>Standard-deviation</i>
UMAT	Programme d'utilisateur - <i>User material subroutine</i>
CSSC	Courbe de contrainte-déformation cyclique - <i>Cyclic stress-strain curve</i>
RT	Température ambiante - <i>Room temperature</i>
SRO	Ordre à courte portée - <i>Short-range order</i>

Introduction

a. Contexte industriel

Le secteur nucléaire fournit une source d'énergie durable à un coût compétitif, et produit de l'électricité à faible émission de carbone. Actuellement les 58 Réacteurs à Eau Pressurisée (REP) actifs en France produisent environ 75% de l'énergie électrique. Avec le vieillissement d'une partie de ces réacteurs et leur mise à l'arrêt déjà envisagée, une troisième génération de réacteurs (EPR – European Pressurized Reactor) est prévue pour remplacer progressivement les REP.

Pour répondre aux besoins du futur à plus long terme, le Forum International Génération IV a été lancé en 2000. L'objectif est de définir un système nucléaire pour l'avenir (quatrième génération) et de développer des technologies encore plus performantes. Cette nouvelle génération de réacteurs doit renforcer les critères d'économie des ressources, de développement durable et de sûreté. Dans le cadre du développement des réacteurs de 4ème Génération, le CEA (Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives) étudie la conception du réacteur ASTRID (Advanced Sodium Technological Reactor for Industrial Demonstration) [1], un Réacteur à Neutron Rapide refroidi au sodium (RNR-Na).

L'acier austénitique 316L(N) est le matériau de référence pour des nombreuses structures du circuit primaire d'ASTRID. Cette nuance, issue du retour d'expérience des RNR-Na en France, a été choisie en raison de sa compatibilité avec le sodium et de ses propriétés mécaniques à la température de fonctionnement, de l'ordre de 550°C. En effet, le domaine de température de fonctionnement des RNR-Na est plus élevé que celui des REP, dans lesquels la température maximale est de l'ordre de 330°C. Le comportement visqueux du matériau est plus significatif dans le cas des RNR-Na, ce qui conduit à dimensionner les structures vis-à-vis des risques de fluage, de fatigue et de fatigue-relaxation et de la déformation progressive (Figure 0.1).

En effet, les structures des réacteurs sont conçus pour fonctionner à hautes températures (450-550°C), sous des chargements cycliques, lors de transitoires, ce qui induit un endommagement de fatigue dans le matériau. Les phases de chargement-déchargement incluent de longs maintiens, de l'ordre d'un mois, avec des chargements de type fluage, relaxation et une cavitation intragranulaire parfois observée.

S'appuyant sur le retour d'expérience des RNR-Na (RAPSODIE, PHENIX, SUPERPHENIX), la nouvelle génération de réacteurs fonctionnera pour une période de 60 années, au lieu des 30 années pour lesquelles ont été dimensionnés les réacteurs précédents. Cette extension de la durée de vie des réacteurs doit être accompagnée d'améliorations des

règles de dimensionnement et d'un programme d'une qualification des matériaux et des structures.

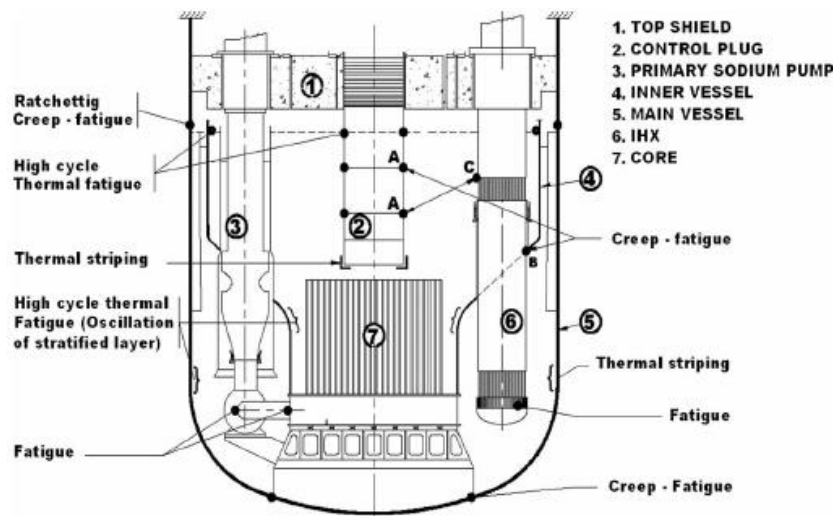


Figure 0.1 Nature de différents modes d'endommagement potentiels dans les réacteurs de type RNR-Na [2].

« High temperature failure modes in a sodium-cooled fast reactor type [2]. »

b. Comportement de l'acier 316L(N)

Dans l'optique du dimensionnement du réacteur ASTRID, le CEA a lancé, au cours 20 dernières des années, plusieurs actions expérimentales, permettant d'analyser le comportement des matériaux utilisés lors de la conception des réacteurs, y compris l'acier 316L(N). L'objectif étant d'apporter des éléments supplémentaires pour mieux dimensionner les composants des structures en situations normale et accidentelle. Pour cela, des essais de fluage, de fatigue-relaxation et de déformation progressive ont été réalisés.

En complément des campagnes expérimentales menées par le CEA, de nombreux travaux disponibles dans la littérature scientifique permettent d'étudier le comportement macroscopique et microscopique de l'acier 316L(N), à température ambiante et à température élevée.

Ces études ont conduit à caractériser les mécanismes actifs lors de la déformation dans le domaine de température qui nous intéresse, tels que le vieillissement dynamique (DSA – *Dynamic Strain Ageing*) et la restauration par montée des dislocations. Toutefois, la prise en compte de tous ces mécanismes dans un modèle unique, pour une prédiction fiable du comportement mécanique de l'acier 316L(N), reste encore délicate. Les modèles proposés jusqu'à maintenant, de mise en œuvre complexe et nécessitant l'identification inverse d'un grand nombre de paramètres n'ont pas permis à ce jour d'étendre leur utilisation. De ce fait, il apparaît nécessaire de proposer des modèles plus robustes, adaptés aux capacités de

calcul usuelles et qui permettront de proposer des prédictions hors de la base expérimentale du laboratoire.

c. La modélisation du comportement mécanique

La modélisation du comportement mécanique des matériaux lors d'un chargement cyclique et notamment la déformation progressive a fait l'objet de nombreuses études au cours des dernières années. Cette modélisation s'appuie sur deux principales approches : les modèles phénoménologiques et les modèles micromécaniques (Figure 0.2).

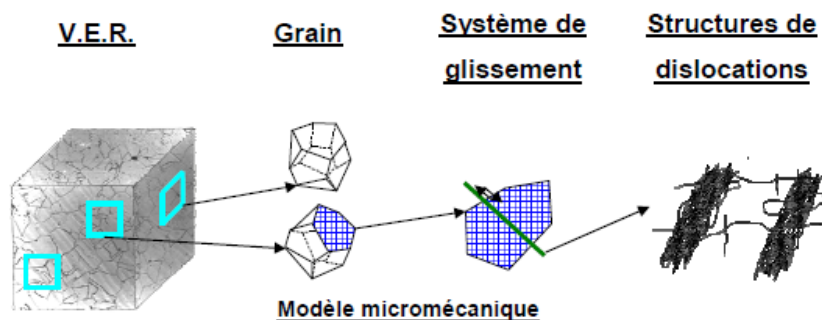


Figure 0.2 Schématisation de différentes échelles de modélisation [3].

« Scheme showing the different modeling scales [3]. »

L'approche phénoménologique est essentiellement inductive, basée sur l'observation et l'analyse des résultats mécaniques. Les variables introduites pour prendre en compte les phénomènes observés sont définies à l'échelle macroscopique du volume élémentaire représentatif (VER) (Figure 0.2). Le concept de variable interne est largement utilisé. La validité de ce type de modèle dans le cadre de la thermodynamique des milieux continus est généralement limitée au domaine expérimental utilisé pour l'identification inverse des paramètres du modèle, c'est-à-dire à la base expérimentale utilisée pour ajuster les coefficients du matériau [4]. C'est un des inconvénients de cette approche générique, et son utilisation doit être envisagée avec prudence en terme de prédiction en dehors de ce domaine d'identification inverse [5–8]. Une difficulté essentielle réside dans le choix des essais d'identification et de validation, notamment dans l'optique des conditions en service visées (amplitudes de déformation, temps de maintien, température, chargement moyen, etc.). Toutefois, étant donné la facilité de mise en œuvre de ces modèles dans les codes de simulation numérique, ils sont utilisés dans les logiciels de calcul industriels.

L'approche micromécanique, schématisée sur la Figure 0.2, se réfère à la description physique du matériau et de son évolution sous chargement. C'est une méthode déductive qui considère différentes échelles pour prédire le comportement macroscopique du matériau (VER) [9]. Elle s'appuie sur des observations microstructurales dont l'objectif est de mettre en évidence les mécanismes élémentaires de la déformation (visco)plastique. La prédiction du comportement du volume élémentaire pour ce type de modèle nécessite le

développement de techniques de changement d'échelles. Cela permet à priori d'accéder à un domaine de validité plus large que ceux des modèles phénoménologiques, mais le temps de calcul peut être beaucoup plus long, étant donné le nombre de variables internes présentes dans ce type de modèle (nombre de grains, nombre de systèmes de glissement, nombre de variables internes par système de glissement). Pour éviter de très longs temps de calcul, notamment dans les cas de chargements cycliques à grande nombre de cycles ($N > 10000$), les modèles d'homogénéisation ou « modèles à champs moyens » peuvent être appliqués. Ces modèles permettent la transition entre l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique, avec une réponse de calcul plus rapide.

d. Objectifs de la thèse et plan du rapport de thèse

L'objectif de la thèse est de développer un modèle permettant de prédire le comportement de l'acier 316L(N), en se basant sur la description des mécanismes de déformation viscoplastique à température ambiante et à température élevée. Ce modèle devra être de mise en œuvre simple et nécessiter l'identification d'un nombre de paramètres matériau limité. Pour cela, nous nous appuyerons sur la connaissance des mécanismes de viscoplasticité cyclique et des microstructures de dislocations de l'acier 316L(N), ainsi que d'autres alliages de structure cubique à faces centrées (CFC), tel que Al, Cu, Ni, 304L, Cu-Zn etc. Le modèle développé devra être validé par comparaison aux nombreux résultats d'essais issus de la littérature et du CEA, ainsi qu'au regard des observations et mesures à l'échelle des grains (densités des dislocations).

La démarche générale de développement du modèle peut être résumée en plusieurs étapes :

1. Choix du modèle de transition d'échelle ;
2. Mise en œuvre et validation d'un modèle à température ambiante ;
3. Introduction des mécanismes actifs à température élevée et validation du modèle vis-à-vis des chargements cycliques, de la relaxation et de la déformation progressive.

Ces étapes sont décrites en détails dans les différents chapitres de ce manuscrit. Au premier chapitre, nous présentons les principales caractéristiques de l'acier inoxydable austénitique 316L(N). Dans ce chapitre, une synthèse des connaissances sur le comportement du matériau dans le domaine de températures entre 293 K et 873 K est proposée. Une analyse détaillée de l'évolution des structures de dislocations est présentée pour différents types des sollicitations mécaniques : traction, relaxation, fatigue, rochet, fatigue-relaxation. L'objectif est de mettre en évidence les principaux mécanismes physiques liés à la déformation viscoplastique de l'acier 316L(N) et des alliages CFC.

Le deuxième chapitre est consacré à la proposition et à la validation des modèles de transition d'échelle. Trois modèles auto-cohérents sont considérés : le modèle thermoélastique proposé par Kröner, le modèle élasto-viscoplastique de Mercier et Molinari et une nouvelle loi élasto-viscoplastique développée dans le cadre de la thèse, appelée Kröner-Secant. Les prédictions des différents modèles en champs-moyens sont comparées aux résultats obtenus par des calculs par éléments-finis en champs complets. La validité de ces modèles est évaluée sur une large gamme de viscosité et d'écrouissage cristalline. De nombreux types de chargements sont appliqués : monotones (traction, relaxation, fluage) et cycliques (chargements symétriques et non-symétrique, déformation progressive). Cette étape vise à choisir la loi de transition d'échelle capable de mieux décrire le comportement élasto-viscoplastique des polycristaux CFC.

Dans le troisième chapitre, nous présentons les lois de viscoplasticité cristalline basées sur l'évolution de différentes populations de densités des dislocations, permettant de prédire le comportement cyclique des aciers inoxydables austénitiques 316L(N) dans la plage de température comprise entre 293K et 523K. Les lois d'évolution de différentes populations de densités de dislocations (coins, vis et dipôles) sont décrites en prenant en compte les mécanismes physiques de la déformation viscoplastique. Un nombre réduit de Seuls les deux paramètres de viscoplasticité cristalline doivent être ajustés. Des courbes de traction à différentes vitesses de chargement et températures sont utilisées pour cette identification inverse.

Des améliorations de ce modèle sont proposées dans le quatrième chapitre. En particulier, une description plus directe de l'effet de l'interaction entre les systèmes de glissement sur le taux de production des dislocations est introduite. Pour cela, des lois récemment obtenues grâce à la dynamique des dislocations discrètes [10] sont mises en œuvre. Dans ce chapitre, un modèle de changement d'échelle permettant de mieux rendre compte de la localisation de la déformation plastique dans les bandes de glissements, largement observées dans les métaux CFC, est aussi proposé. Ces lois permettent l'activation d'un plus faible nombre de systèmes de glissement par grain ainsi qu'une meilleure prise en compte de l'effet de l'énergie de faute d'empilement sur le comportement des métaux CFC.

Dans le dernier chapitre, les mécanismes de déformation observés aux températures élevées, tels que le vieillissement dynamique et la montée des dislocations sont introduites. Des lois simplifiées complètent le modèle développé à température ambiante pour décrire ces mécanismes qui jouent un rôle important sur le comportement du matériau à température élevée. La validité du modèle polycristallin est ensuite évaluée par comparaison avec de nombreux résultats d'essais expérimentaux monotones et cycliques sur l'acier 316L(N) à température élevée.

Enfin, une conclusion générale rappelle les principaux résultats de ce travail, les avancées et les limites du modèle, et propose quelques voies d'amélioration ou d'adaptation pour une évaluation robuste de la déformation progressive de l'acier 316L(N) à température élevée.

1 Caractérisation macroscopique et microscopique du comportement mécanique de l'acier 316L(N) lors des chargements cycliques

Dans ce chapitre, les principales caractéristiques de l'acier inoxydable austénitique 316L(N) sont présentées. Une analyse détaillée du comportement du matériau dans le domaine de température entre 293 K et 873 K est proposée pour différents types de sollicitations mécaniques : traction, déformation cyclique, rochet, fatigue-relaxation. L'objectif est de mettre en évidence les principaux mécanismes physiques de la déformation viscoplastique de l'acier 316L(N).

In this chapter, the main features of the 316L(N) austenitic stainless steel are presented. A detailed analysis of its mechanical behavior, in the temperature range between 293 K and 873 K, is described for different types of mechanical loadings: tensile loading, cyclic deformation, ratcheting, and fatigue-relaxation. The objective is to highlight the main physical mechanisms of viscoplastic deformation of 316L(N) steels.

1.1 Introduction

L'acier 316L(N) est une nuance développée pour le secteur nucléaire, basée sur les aciers inoxydables austénitiques de type chrome-nickel-molybdène. Cette nuance a été sélectionnée pour la fabrication des structures des RNR-Na (Réacteur à Neutron Rapide refroidi au sodium) français fonctionnant à température élevée parce qu'elle présente une bonne résistance à la corrosion sous contrainte et des propriétés mécaniques optimisées en fluage. De plus, l'acier 316L(N) et ses métaux d'apports possèdent des propriétés de soudabilité satisfaisantes permettant une mise en œuvre par des procédés industriels [11].

Dans les conditions de fonctionnement des RNR-Na, les composants de structures sont soumis à des chargements cycliques (fatigue, fatigue-relaxation) à des températures comprises entre 673K et 823K. Dans ce cadre, un grand nombre d'études expérimentales et théoriques ont été menées afin de caractériser et modéliser le comportement viscoplastique de cet alliage.

Les observations expérimentales sur le comportement de ce matériau sont abordées dans ce chapitre, en se basant sur de nombreux résultats d'essais de traction, fatigue, déformation progressive et fatigue-relaxation, à différentes températures. Elles sont issues de la littérature et de la base de données du CEA. Une analyse détaillée de l'évolution des structures de dislocations sera également abordée pour chaque type d'essai, afin de mettre en parallèle le comportement macroscopique et les mécanismes de viscoplasticité.

1.2 Présentation de l'acier 316L(N)

Les aciers inoxydables austénitiques sont des alliages de fer- γ , qui présentent un réseau cristallin CFC (cubique à faces centrés). Ces aciers sont caractérisés par la présence de chrome et nickel, qui sont essentiels pour conférer au matériau la résistance à la corrosion souhaitée (une concentration minimale de l'ordre de 12% en masse de chrome est nécessaire pour considérer un acier comme inoxydable). Chaque élément chimique ajouté à l'alliage exerce une influence sur la structure de l'acier et sur les propriétés mécaniques (durcissement par solution solide interstitielle ou substitutionnelle) [12]. Le Tableau 1.1 résume l'influence des principaux éléments sur la structure et les propriétés de l'alliage.

La structure cubique à faces centrées (CFC), caractéristique des aciers austénitiques, est stabilisée grâce à la présence des éléments gammagènes (C, N, Ni, Mn,...). Des zones de ferrite (structure cubique centré - CC) peuvent être présentes dues à l'influence d'éléments alphas (Cr, Mo,...). La faible teneur en carbone (« L » pour *low carbon*) est préférée afin de minimiser la sensibilisation à la corrosion intergranulaire, en cours de fabrication ou en service, et d'améliorer la résistance à la corrosion sous contrainte. L'addition contrôlée d'azote (N) vise à améliorer les propriétés mécaniques à haute température en compensant la perte excessive de résistance mécanique due à la faible teneur en carbone.

Plusieurs études ont démontré l'influence bénéfique de l'addition contrôlée de l'azote sur la traction, le fluage et la fatigue dans les alliages d'acier inoxydable de type 316L [13–16].

Tableau 1.1 Principaux éléments d'alliage et leur effets dans les aciers inoxydables [12].

« Main alloying elements and their effects in stainless steels [12]. »

Chrome (Cr)	Elément alphasène, substitutionnel. Responsable de l'effet de passivation de l'acier par la formation d'une couche superficielle protectrice d'oxyde de chrome (Cr_2O_3)
Nickel (Ni)	Elément gammagène, substitutionnel. Il élargit le domaine de stabilité de l'austénite et améliore la résistance à la corrosion. De plus, il confère au matériau des bonnes propriétés de soudage.
Molybdène (Mo)	Elément alphasène, substitutionnel. Il augmente la résistance mécanique à chaud et améliore de façon significative la résistance à la corrosion par piqûres (présence d'ions halogènes).
Carbone (C)	Elément gammagène, interstitiel. Essentiel à tous les aciers, il élargit fortement le domaine austénitique. Il augmente la résistance mécanique de l'acier. En quantité supérieure à 0,03% dans les aciers inoxydables, il détériore la résistance à la corrosion intercrystalline et les propriétés de soudabilité.
Azote (N)	Elément gammagène, interstitiel. Il élargit le domaine austénitique et augmente la résistance mécanique de l'acier sans compromettre la ténacité.

Le Tableau 1.2 présente les tolérances de composition chimique imposées par le RCC-MRx pour la nuance 316L(N), ainsi que la composition chimique de la tôle EDF-SQ et de la tôle AVESTA, largement utilisées dans le programme expérimental du CEA. Le Tableau 1.3 présente les caractéristiques générales de ces deux approvisionnements. L'acier 316L(N) peut présenter une teneur de ferrite résiduelle, de l'ordre de 3%. Cependant Gentet [3] considère que la fraction de ferrite trouvée dans la tôle AVESTA n'influe pas sur le comportement élasto-viscoplastique du matériau.

Tableau 1.2 Tolérance appliquée à la composition chimique recommandées par le RCC-MRx [17] et composition chimique des tôles EDF-SQ [18] et AVESTA [3].

« Chemical composition limits recommended by the RCC-MRx [17] and chemical composition of EDF-SQ [18] and AVESTA [3] steel sheets. »

Eléments	C	N	Cr	Ni	Mo	Mn	Si
RCC-MRx (min)	0,000	0,060	17,00	12,00	2,30	1,60	0,00
RCC-MRx (max)	0,030	0,080	18,00	12,50	2,70	2,00	0,50
EDF SQ	0,030	0,077	17,54	12,46	2,48	1,88	0,44
AVESTA	0,026	0,069	17,27	12,13	2,54	1,74	0,31
Eléments	S	P	Co	Cu	B		
RCC-MRx (min)	0,000	0,000	0,00	0,00	0,000		
RCC-MRx (max)	0,025	0,035	0,25	1,00	0,002		
EDF SQ	0,005	0,028	0,15	0,175	0,001		
AVESTA	0,001	0,025	0,09	0,29	0,001		

En % massique

Tableau 1.3 Caractéristiques de la tôle EDF SQ [18] et AVESTA [3]

« Characteristics of EDF SQ [18] and AVESTA [3] steel sheets. »

	Tôle SQ	Tôle AVESTA
Paramètre de maille	$a_\gamma = 0,3595 \text{ nm}$	$a_\gamma = 0,3595 \text{ nm}$
Taille de grain moyenne	$53 \mu\text{m}$	$50 \mu\text{m}$
Texture particulière	négligeable	négligeable
Densité de dislocation à l'état hypertrempe	$\rho_o \sim 10^{10} \text{ m}^{-2}$	$\rho_o = 3,4 \cdot 10^{12} \text{ m}^{-2}$
%Ferrite présent	Inconnu	$3 \pm 1 \%$

1.3 Les mécanismes de déformation plastique des métaux et alliages CFC

Dans le domaine plastique, les métaux et alliages CFC se déforment principalement par le glissement des dislocations. Ce glissement est activé sur le système de glissement i lorsque la valeur absolue de la cission résolue, $|\tau^i|$, atteint la cission résolue critique, τ_0 . Pour les structures cubiques à faces centrées, les plans octaédriques $\{111\}$ et les directions $\langle 110 \rangle$ définissent 12 systèmes de glissement facile. La cission résolue sur chaque système de glissement est définie par la loi de Schmid :

$$\tau^i = \sigma \cdot f^i \quad \text{Équation 1.1a}$$

$$f^i = \cos \alpha_n \cdot \cos \alpha_l \quad \text{Équation 1.1b}$$

où α_l et α_n sont les angles entre la direction de sollicitation et respectivement la direction de glissement (\vec{l}) et la normale au plan de glissement (\vec{n}) (Figure 1.1.a). Le facteur de Schmid est noté f^i et dépend du système de glissement i et de la direction cristalline. La relation entre la direction de sollicitation et les systèmes de glissement est usuellement représentée sur une projection stéréographique, où chacun des triangles définit une région dans laquelle un système particulier de glissement opère (Figure 1.1.b). Le facteur de Schmid maximal pour une direction de l'axe de sollicitation donnée représentée dans le triangle standard (Figure 1.1.c) est un bon indicateur, caractérisant le rôle de l'orientation du cristal sur la déformation plastique [19–21].

En effet, dès que la cission résolue sur le système de glissement i atteint la cission critique (τ_0), le glissement des dislocations mobiles sur le plan de glissement devient possible, et la déformation plastique est activée. Suivant le niveau de sollicitation et l'orientation du cristal, il est possible qu'aucun système de glissement ne soit activé (absence de glissement), qu'un seul système soit activé (glissement simple) ou que plusieurs systèmes s'activent (glissement multiple). Le glissement peut avoir un caractère planaire, caractérisé par le glissement des dislocations dans des plans atomiques précis. Dans un matériau non-planaire, une dislocation vis peut changer de plan de glissement pour glisser dans le plan dévié (Figure 1.2). Dans le cas du glissement dévié, les deux plans doivent contenir la ligne de dislocation, ce qui implique que seules les dislocations vis peuvent être déviées.

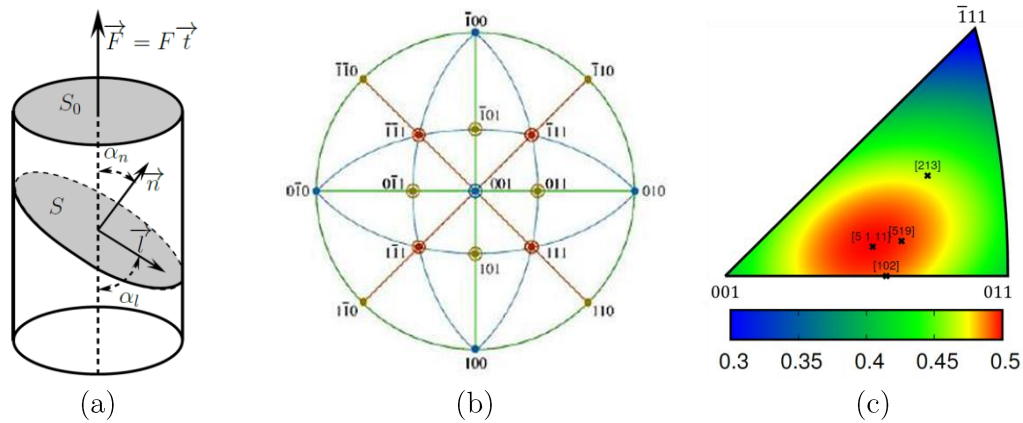


Figure 1.1 (a) Schéma de calcul de la contrainte de cisaillement résolue selon la Loi de Schmid. (b) Projection stéréographique à partir de l'orientation $[100]$, montrant les 24 triangles standards équivalents pour un monocristal CFC. (c) Isovaleurs du facteur de Schmid maximal dans le triangle standard.

« (a) Schematic diagram explaining the shear stress calculation according to Schmid's law. (b) Stereographic projection from the $[100]$ orientation, showing the 24 equivalent standard triangles for a FCC single crystal. (c) Isovalues of the maximum Schmid factor in the standard triangle. »

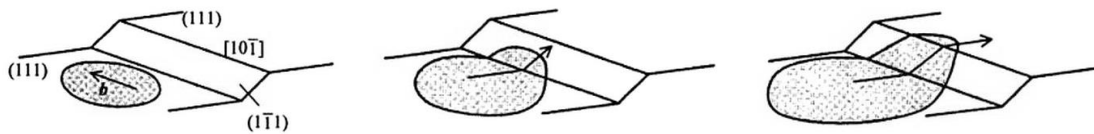


Figure 1.2 Schématisation du glissement dévié d'une boucle de dislocation dans un CFC .

« Schematization of double cross-slip of a dislocation loop in a FCC material. »

L'énergie de faute d'empilement (γ_{SFE}) des métaux et alliages CFC qui détermine la résistance au glissement des dislocations dans leur plan, joue un rôle important dans les mécanismes de glissement. Le

Tableau 1.4 présente les valeurs des énergies de faute d'empilement pour quelques métaux et alliages CFC et les valeurs de γ_{SFE} normalisées par le produit du module de cisaillement, μ , et de la norme du vecteur de Burgers, b . Différentes équations ont été proposées dans la littérature pour déterminer l'énergie de défaut d'empilement des aciers inoxydables austénitiques [22–25]. Ces études révèlent une grande complexité pour le calcul de γ_{SFE} dans le cas de ces aciers. Nous nous contentons ici de calculer γ_{SFE} pour des alliages d'acier 316L(N) à l'aide de l'expression empirique proposé par Pickering [24] :

$$\gamma_{SFE} = 25,7 + 2 \cdot \%Ni + 410 \cdot \%C - 0,9 \cdot \%Cr - 77 \cdot \%N - 13 \cdot \%Si - 1,2 \cdot \%Mn \quad \text{Équation 1.2}$$

Tableau 1.4 Énergies de faute d'empilement pour différents matériaux CFC, adaptée de [18].

« Stacking fault energies for different FCC metals and alloys, adapted from [18]. »

Alliages	γ_{SFE} (mJ/m ²)	$\gamma_{SFE}/\mu b$ (10 ⁻³)
Cu30%Zn	7	0,7
316L(N) – Tôles SQ/Avesta*	31,5/33*	1,6-1,7
Cu	50	4,0
Ni	125	5,5
Al	135	20,3

*calculé par l'expression de Pickering

Le glissement dévié est réalisé en surmontant une barrière d'énergie, correspondant à l'énergie de la ligne de dislocation [26]. Il est montré que la nature du glissement (glissement planaire ou dévié) est directement influencée par $\gamma_{SFE}/\mu b$ [26,27]. Le glissement dévié est favorisé dans l'aluminium et nickel en raison de la valeur élevée de $\gamma_{SFE}/\mu b$ [28,29]. Dans le cas de l'acier 316L(N), la valeur de $\gamma_{SFE}/\mu b$ limite l'apparition du glissement dévié.

Les dislocations interagissent avec différents obstacles présents dans le réseau cristallin (des atomes de soluté, d'autres dislocations ou des carbures à plus haute température), conduisant à un durcissement du matériau [30,31]. Pour franchir ces obstacles, une énergie minimale doit être fournie. Cette énergie peut être fournie mécaniquement et assistée par l'agitation thermique, comme cela est illustré schématiquement sur la Figure 1.3. L'énergie apportée mécaniquement de caractère athermique, correspond à l'interaction élastique entre les dislocations. L'énergie fournie par agitation thermique, appelée « contrainte visqueuse », dépend de la température et de la vitesse de déformation [32–34].

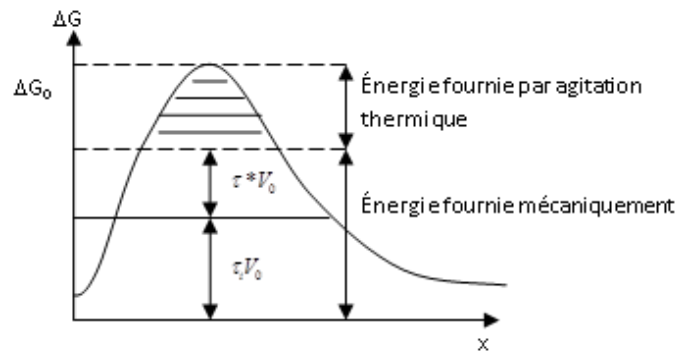


Figure 1.3 Énergie minimale pour franchir des obstacles lors de la déformation viscoplastique.

« Minimum energy to overcome obstacles during viscoplastic deformation »

Au cours de leurs glissements, les dislocations mobiles peuvent se multiplier (moulins de Frank et Read), se combiner (formation des dipôles) ou même s'annihiler (restauration dynamique, restauration des dipôles par montée des dislocations). Il convient de noter que certains mécanismes sont assistés par la température, tel que la distance critique d'annihilation entre deux dislocations de signes opposés qui se déplacent sur deux plans parallèles [35] et la montée des dislocations [36].

Un deuxième mécanisme de déformation plastique est caractérisé par la formation de macles. Le mécanisme, maclage ou glissement, qui est activé en priorité est celui qui présente la contrainte critique la plus faible dans les conditions de température et de déformation considérées. Cai et al. [37] montrent que dans le cas des CFC les macles de déformation sont favorisées à basse température ou à vitesse de déformation élevée. Les macles sont plus fréquentes dans les métaux et alliages CFC qui présentent une faible γ_{SFE} [38,39]. Toutefois, pour l'acier 316L(N), Gaudin [18] montre que les macles de déformation ne sont pas nombreuses dans l'acier 316L(N) déformé à température ambiante.

Des nombreuses études [13,29,37,38,40–45] indiquent que plusieurs autres facteurs, tels que l'orientation du grain par rapport à l'axe de sollicitation, la taille des grains (effet des joints de grains), la teneur et la nature des éléments en solution solide et la vitesse de déformation appliquée, influencent les mécanismes de déformation des métaux et alliages CFC.

1.3.1 Interactions entre dislocations

Le mouvement des dislocations est freiné par la friction de réseau et par l'interaction avec les dislocations voisines. La cission critique pour le glissement des dislocations peut être reliée aux densités des dislocations totale, ρ , dans tous les systèmes de glissement par l'équation de Taylor :

$$\tau = \bar{\alpha}\mu b \sqrt{\rho} \quad \text{Équation 1.3}$$

Où $\bar{\alpha}$ représente un coefficient de durcissement. Dans le cas des métaux CFC, $\bar{\alpha} = 0.35 \pm 0.15$ [10]. Toutefois, une anisotropie d'interaction entre les systèmes de glissement est observée dans le cristal [46–48].

Les différents types d'interactions entre dislocations entraînent le durcissement du matériau lorsque la déformation plastique induit la multiplication de dislocations sur différents systèmes. Ces interactions sont caractérisées par une force d'interaction entre deux systèmes de glissement (i) et (j) [49]. Franciosi [47,48] a proposé une écriture de ces interactions sous forme d'une matrice symétrique, selon les notation de Schmid et Boas [50] (Figure 1.4 et Figure 1.5).

Système	Ab	Ac	Af	Bb	Bd	Be	Ca	Cc	Ce	Da	Dd	Df
Plan	$(\bar{1}11)$			(111)			$(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$			$(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$		
Direction	$[0\bar{1}1]$	$[101]$	$[110]$	$[0\bar{1}1]$	$[\bar{1}01]$	$[\bar{1}10]$	$[011]$	$[101]$	$[\bar{1}10]$	$[011]$	$[\bar{1}01]$	$[110]$

Figure 1.4 Systèmes de glissement facile pour un CFC selon la notation de Schmid et Boas [50].

« Easy slip systems for a FCC according to the Schmid and Boas notation [50]. »

Ab	Ac	Af	Bb	Bd	Be	Ca	Cc	Ce	Da	Dd	Df	
h_0	h_1	h_1	h_3	h_4	h_4	h_2	h_4	h_5	h_2	h_5	h_4	Ab
	h_0	h_1	h_4	h_2	h_5	h_4	h_3	h_4	h_5	h_2	h_4	Ac
		h_0	h_4	h_5	h_2	h_5	h_4	h_2	h_4	h_4	h_3	Af
			h_0	h_1	h_1	h_2	h_5	h_4	h_2	h_4	h_5	Bb
				h_0	h_1	h_5	h_2	h_4	h_4	h_3	h_4	Bd
					h_0	h_4	h_4	h_3	h_5	h_4	h_2	Be
						h_0	h_1	h_1	h_3	h_4	h_4	Ca
							h_0	h_1	h_4	h_2	h_5	Cc
								h_0	h_4	h_5	h_2	Ce
									h_0	h_1	h_1	Da
										h_0	h_1	Dd
											h_0	Df

Figure 1.5 Matrice d'écrouissage [47].

« Hardening matrix [47] »

Les différents types d'interactions entre dislocations peuvent être représentés par seulement six coefficients indépendants. Le premier coefficient décrit les interactions d'un système avec lui-même, auto-écrouissage (h_0). Un coefficient permet de tenir compte des interactions coplanaires ($h_3 = h_{copla}$) et trois coefficients sont utilisés pour caractériser les interactions entre les systèmes de glissement non-coplanaires, conduisant à la formation des jonctions de type « arbre de forêt » telles que les jonctions de Hirth ($h_2 = h_{Hirth}$), les jonctions glissiles ($h_4 = h_{glis}$) et les verrous de Lomer-Cottrell ($h_5 = h_{Lomer}$). Le dernier coefficient représente les interactions colinéaires ($h_1 = h_{coll}$). Plusieurs auteurs [46,49,51,52] ont étudié et proposé un classement de ces interactions selon un potentiel de durcissement. Ces coefficients ont récemment été déterminés par la dynamique des dislocations pour les métaux CFC [10]. Ces résultats seront utilisés au cours de cette thèse, permettant d'éviter la multiplication des paramètres ajustables, en bénéficiant des recherches approfondies menées en dynamique des dislocations discrètes.

1.3.2 Le vieillissement dynamique (DSA)

Le vieillissement dynamique ou DSA (*dynamic strain ageing*) est un phénomène qui provoque un durcissement supplémentaire du matériau, dans certaines conditions de températures et de vitesses de déformation. Ce durcissement est attribué aux interactions entre les atomes de solutés présents dans la matrice métallique et les dislocations.

Les premières hypothèses sur l'origine de ce durcissement, proposées par Cottrell et Bilby [53], reposent sur la diffusion des atomes de solutés vers les zones d'ancrage préalable des dislocations. Ce processus favorise l'ancrage des dislocations et une contrainte supplémentaire est nécessaire pour déverrouiller les dislocations.

Une autre hypothèse proposée par Suzuki [54] considère que les atomes de solutés diffusent vers les dislocations qui sont décomposées en deux partielles. La création d'une atmosphère de solutés stabilise la dissociation des dislocations partielles, et joue un rôle important sur l'énergie de faute d'empilement des matériaux. Ce mécanisme a deux effets : l'atmosphère d'atomes diminue l'énergie de défaut d'empilement, résultant en un caractère plus planaire du glissement, et participe également à l'ancrage de dislocations.

Sur les courbes contrainte-déformation en traction ou en fatigue, le DSA est mis en évidence par l'apparition de serrations, dues à des oscillations de la contrainte, nommées effet Portevin–Le Chatelier (PLC). Les Figure 1.6a présente des serrations observées lors d'un essai de traction, comprenant des sauts de vitesse de déformation, et la Figure 1.6b montre les serrations observées lors d'un essai cyclique, dans le cas de l'acier 316L(N) à 873 K. Selon Isaac-Samuel *et al.* [55], lorsque la contrainte appliquée atteint une valeur critique, une bouffée de dislocations est mise en mouvement, provoquant une baisse de la contrainte macroscopique, ce qui conduit aux serrations observées sur les courbes.

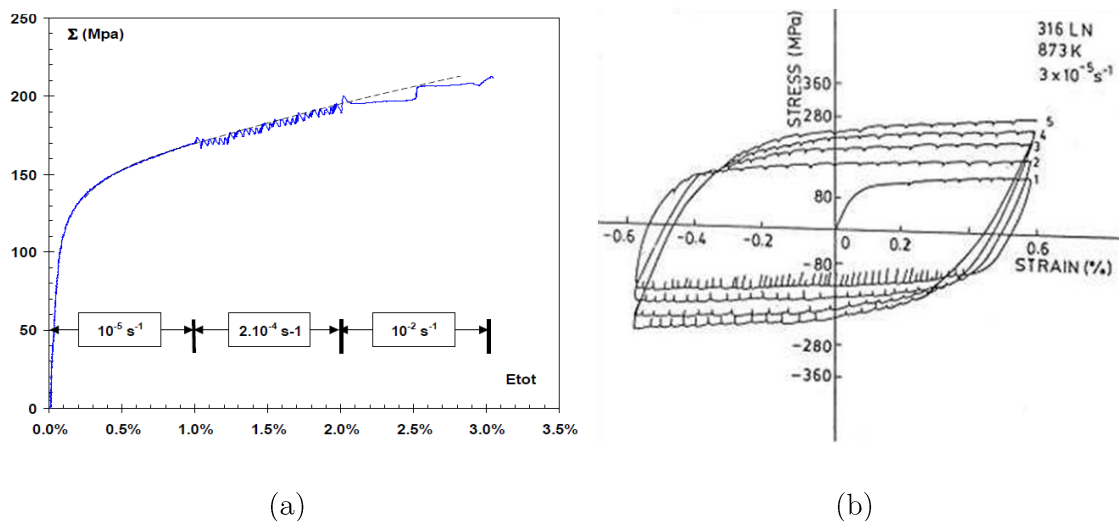


Figure 1.6 (a) Courbe de traction avec sauts de vitesse de déformation [3] et (b) boucle contrainte-déformation jusqu'au 5ème cycle [56]. Acier 316L(N) à 873 K.

« (a) Tensile curve at different strain rate jumps [3] and (b) stress-strain curves up to the 5th cycle [56]. 316L(N) SS at 873 K. »

Différents types de serrations ont été décrites dans la littérature [55,57–60]. L'apparition de chaque type de serration dépend de différents mécanismes physiques. Dans le cadre de ce travail, les serrations résultent des interactions entre dislocations et solutés. Selon Blanc [57], des essais à déformation imposée, machine « dure », ou à contrainte imposée, machine « molle », sont utilisés dans l'analyse des serrations. Dans le cas du DSA, des essais à déformation imposée sont le plus utilisés.

Le domaine d'existence de l'effet PLC pour un acier 316L(N) dépend de la vitesse de déformation (\dot{E}) et de la température. Les limites de ce domaine présentées à la Figure 1.7, sont définies par deux droites qui suivent une loi de type Arrhenius d'équation :

$$\dot{E}^{vp} = \dot{E}_0 \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) \quad \text{Équation 1.4}$$

où Q est l'énergie d'activation, R est la constante des gaz parfaits et T est la température. Choudhary [61,62] a comparé les valeurs de Q aux énergies de diffusion des principaux éléments d'alliage du 316L(N). Il constate que pour le domaine à plus basse température, entre 523 K et 723 K, cette valeur ($Q_{br} = 133 \text{ kJ.mol}^{-1}$) est proche des énergies de diffusion du carbone ($Q_{\gamma}^c = 138 \text{ kJ.mol}^{-1}$), et que pour le domaine à haute température, entre 723 K et 923 K, cette valeur ($Q_{hr} = 278 \text{ kJ.mol}^{-1}$) est proche des énergies de diffusion du Chrome ($Q_{\gamma}^{Cr} = 243 \text{ kJ.mol}^{-1}$). Cette analyse a été également reportée par Blanc [57] dans le domaine du DA à haute température.

Pham et Holdsworth [63] attribuent le premier régime du DSA (défini dans la suite par DSA1) à la diffusion des éléments interstitiels dans la matrice suivant le mécanisme de Suzuki, favorisant la formation d'une structure planaire. Selon Blanc [57], le deuxième régime (défini dans la suite par DSA2) est caractérisé par l'ancrage des dislocations par les éléments substitutionnels, ce qui favorise le glissement dévié et, donc, une structure plus hétérogène. Ces mécanismes sont également proposés par d'autres auteurs pour expliquer l'apparition de phénomène de type DSA sur différents aciers inoxydables austénitiques [3,58,64-69].

Le DSA peut également se traduire par une sensibilité inverse à la vitesse de déformation, lors d'un chargement monotone ou cyclique. La Figure 1.8.a présente cet effet dans le cas de l'acier 316L(N), sous un chargement cyclique ($E_a = \pm 0,6\%$) à 773K. Dans ces conditions, l'amplitude de contrainte augmente lorsque la vitesse de déformation diminue. Cet effet est lié à la dynamique d'ancrage des dislocations. À température élevée, le temps d'attente des dislocations ancrées sur les obstacles augmente et le temps de vieillissement diminue (la diffusion est un processus thermiquement activé). Il en résulte une contrainte critique plus importante pour déverrouiller les dislocations et réinitialiser la déformation viscoplastique [70]. Pour l'acier 316L(N) [3,66,71-74], le domaine d'activation du phénomène du DSA se situe entre 473 K et 923 K, ce qui correspond aux conditions de fonctionnement des composants dans le RNR-Na.

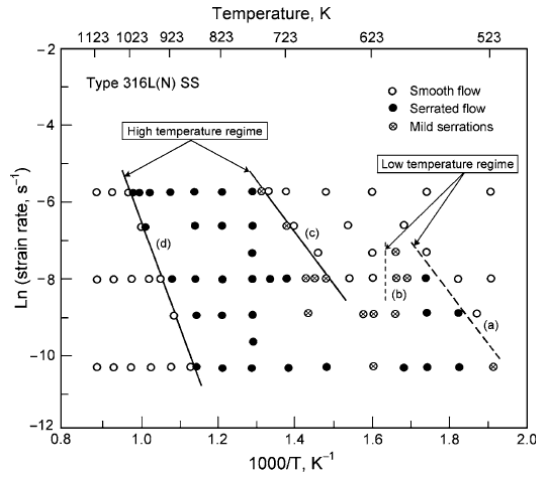


Figure 1.7 Présence de deux domaines d'existence de serrations pour l'acier 316 L(N) [61].

« Presence of two domains of serration for the 316 L(N) SS [61]. »

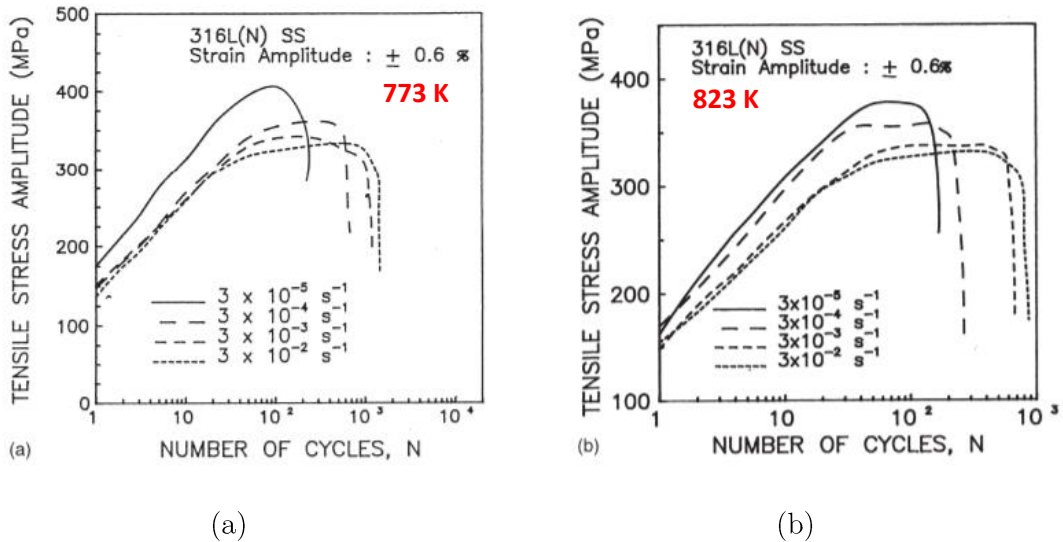


Figure 1.8 Courbe d'érouissage cyclique pour un acier 316L(N), $E_a = \pm 0,6\%$ à différentes vitesses de déformation. (a) 773 K et (b) 823 K [56].

« Cyclic stress response as a function of strain rate for 316L(N) SS, $E_a = \pm 0,6\%$. (a) 773 K and (b) 823 K [56]. »

1.4 Comportement mécanique de l'acier 316L(N)

1.4.1 Comportement en traction monotone

Le comportement élastique, est défini par le tenseur d'élasticité du quatrième ordre, $\underline{\underline{C}}$: $\sigma_{ij} = C_{ijkl} \cdot \varepsilon_{kl}$, ou par le tenseur du deuxième ordre selon la notation de Voigt. Pour un cristal à structure cubique (cubique à face centrée, CFC, ou cubique centré, CC). Les composantes de C_{ijkl} se réduisent à trois paramètres, C_{11} , C_{12} et C_{44} , si les relations élastiques ont écrites dans le repère cristallin [75]. Le coefficient d'anisotropie élastique (a) est défini par :

$$a = \frac{2 C_{44}}{C_{11} - C_{12}} \quad \text{Équation 1.5}$$

Un matériau est isotrope, si $a = 1$. Dans le cas d'un monocristal de 316L(N) à 300 K, $a = 3,3$, avec $C_{11} = 197,5 \text{ GPa}$, $C_{12} = 125 \text{ GPa}$ et $C_{44} = 122 \text{ GPa}$. Cette valeur élevée de a témoigne la forte anisotropie élastique du matériau à l'échelle du grain [19,76]. Ces paramètres varient en fonction de la température.

Si la texture cristallographique est négligeable, l'acier 316L(N) est quasiment isotrope à l'échelle polycristalline. Dans ce cas, le module d'Young (Y) et le coefficient de Poisson (ν) suffisent à décrire le comportement élastique du matériau à l'échelle macroscopique. La Figure 1.9 présente différentes courbes d'évolution du module d'Young avec la température pour différentes nuances d'acier 316 [3,17,18,76–78]. Le module d'Young a tendance à diminuer linéairement entre 200 K et 900 K. Une chute d'environ 50 GPa est observée dans le domaine de température concerné par cette étude (293 K à 873 K).

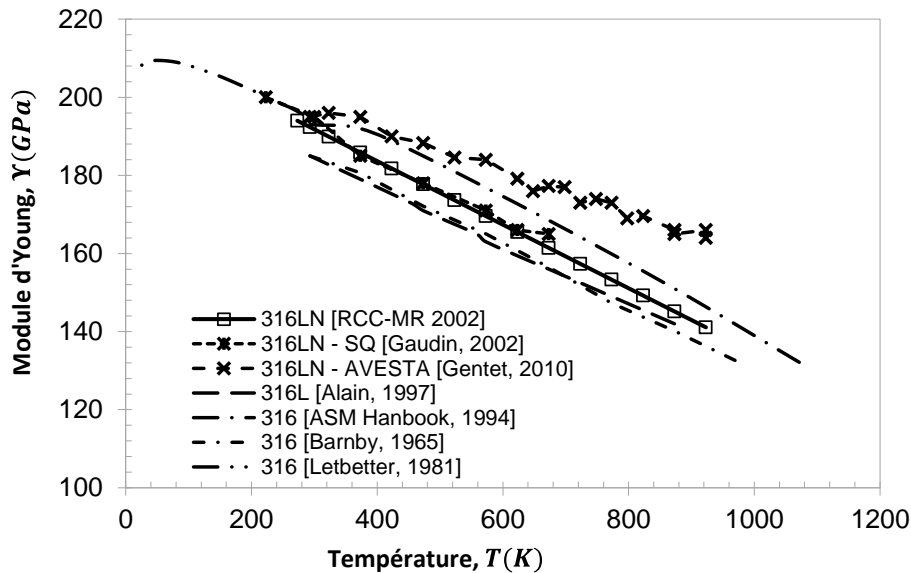


Figure 1.9 Influence de la température sur le module de Young (Y) de différentes nuances d'acier 316 [3,17,18,76–78].

« Influence of temperature on the Young's modulus (Y) of different 316 steels grades [3,17,18,76–78]. »

Le comportement d'un monocristal CFC orienté en glissement simple au cours de la déformation plastique peut être représenté par différents stades d'érouissage (Figure 1.10), chacun présentant une structure de dislocations particulière [30,79,80]. Lors du stade I, un seul système de glissement est actif. Les dislocations sont généralement confinées dans leurs plans de glissement et interagissent peu les unes avec les autres, de telle sorte que le taux d'érouissage est très faible ($\sim \mu/2000$) [45]. L'activation plastique du système de glissement primaire conduit à une rotation progressive du cristal par rapport à l'axe de

traction. Ceci conduit à l'activation de systèmes de glissement secondaires, caractérisant le début du stade II.

Au cours des stades suivants, la contrainte d'écoulement dépend des interactions entre les dislocations du système primaire et celles des autres systèmes activés [79]. Le stade II est caractérisé par un module de durcissement constant qui est environ dix fois supérieur à celui du stade I ($\sim\mu/200$) [45]. L'interaction des dislocations des systèmes primaires et secondaires induit la formation de diverses jonctions (cf. Section 1.3.1). La contrainte nécessaire pour continuer à déformer le cristal augmente fortement. Lors du stade II, Karaman *et al.* [14] montrent que la densité des dislocations augmente fortement dans des monocristaux d'acier 316L. Ces observations sont confirmées par les simulations de production de dislocations en dynamique des dislocations [81,82].

Le début du stage III est caractérisé par l'activation généralisée du glissement dévié (annihilation des dislocations vis parallèles et de signes opposés). Pendant le stade III, le taux de stockage des dislocations diminue sous l'effet de la restauration dynamique [79]. Ce terme est généralement utilisé pour décrire les annihilations de dislocations et les réarrangements substantiels de la microstructure de dislocations. Ce mécanisme est activé thermiquement, ce qui induit une dépendance du taux de durcissement avec la température [45].

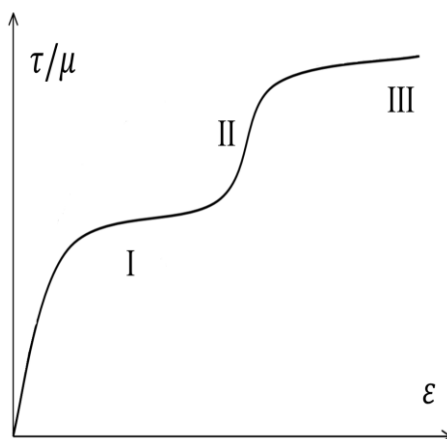


Figure 1.10 Courbe de durcissement typique pour un monocristal orienté en glissement simple.

« Typical hardening curve for a single crystal oriented for single slip »

L'effet de l'orientation de l'axe de sollicitation par rapport à l'orientation cristallographique sur le comportement plastique, en traction et à température ambiante de monocristaux de cuivre et d'acier 316L, est présenté sur la Figure 1.11. Dans le cas où l'axe de traction est proche des orientations cristallines [111] et [001] l'activation multiple de systèmes de glissement est favorisée et le stade I de la déformation n'est pas observé. Cela indique que le taux de production de dislocations dépend fortement de l'orientation cristalline [83].

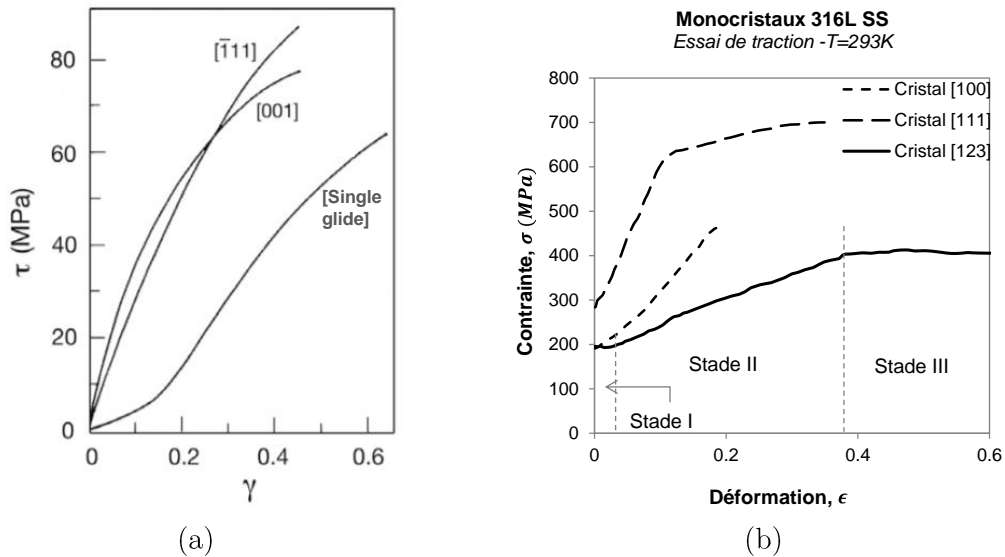


Figure 1.11 Courbes de traction expérimentale obtenue pour des monocristaux de différentes orientations cristallines à température ambiante. (a) Cuivre [83] et (b) Acier 316L, adaptée de [14].

« Experimental tensile curves obtained for single crystals of different crystalline orientations at room temperature. (a) Copper [83] and (b) 316L SS, adapted from [14]. »

Les mêmes stades de déformation sont observés dans un polycristal, mais les systèmes de glissement secondaires peuvent être activés beaucoup plus facilement dû aux fortes contraintes internes induites par les grains voisins, comme il a été démontré par la simulation numérique [84,85]. Toutefois, dans le cas de l'acier 316L(N), la faible valeur de $\gamma_{SFE}/\mu b$ semble favoriser le glissement simple. Des observations par MEB de la surface d'un polycristal de 316L(N) déformé en traction à la température ambiante indiquent l'activation d'un seul système de glissement dans la majorité des grains, même à des fortes déformations imposée, $E^p > 15\%$ (Figure 1.12) [86,87].

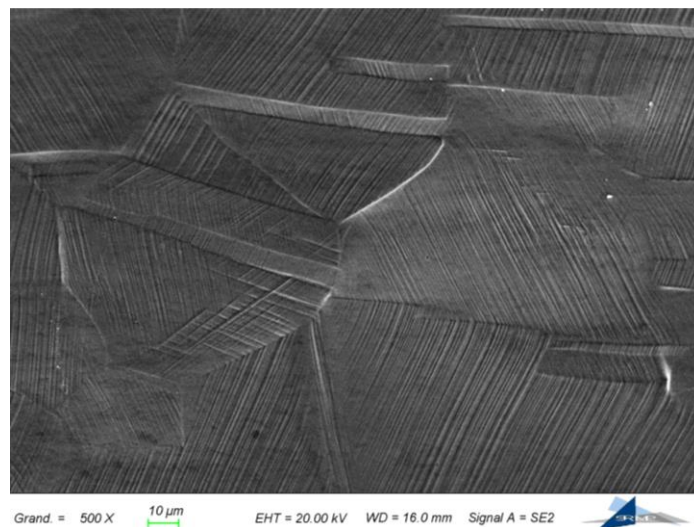


Figure 1.12 Surface d'un acier 316L déformé à 17% en traction à température ambiante [86].

« Surface of a 316L SS deformed up to 17% at room temperature [86]. »

A l'échelle des microstructures de dislocations, le glissement planaire est observé pour une grande partie des grains à $E^p = 3\%$ (Figure 1.13). Toutefois, des microstructures dipolaires sont de plus en plus présentes lorsque la déformation plastique augmente [88–90].

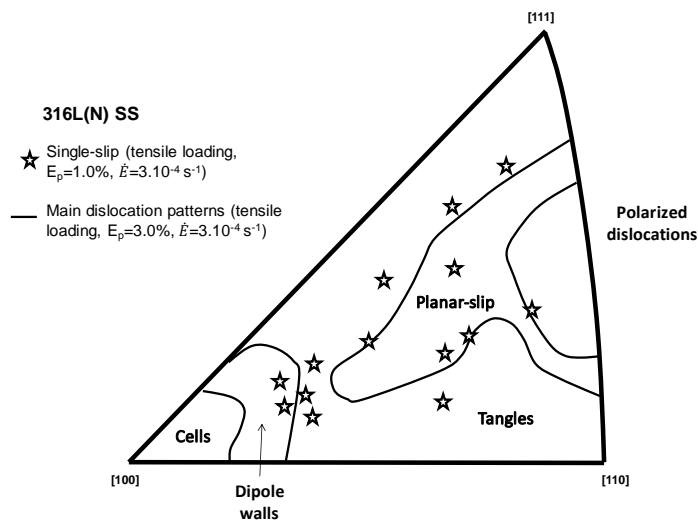


Figure 1.13 Principales microstructures de dislocations observées par MET tracées dans le triangle standard, pour un polycristal d'acier 316L(N), déformé à température ambiante, à $E^p = 1$ et 3% [18].

« Main dislocation patterns observed by TEM plotted in the standard triangle, for a polycrystalline 316L(N) SS deformed at room temperature at $E^p = 1$ and 3% [18]. »

A température plus élevée, l'agitation thermique résulte en une diminution de la contrainte nécessaire pour déformer plastiquement le matériau [79,80] (Figure 1.14). Avec l'augmentation de la température, les mécanismes viscoplastiques sur le comportement du matériau deviennent plus importants [61,72,91–94]. Cependant, certains auteurs montrent que les mécanismes viscoplastiques ne sont pas négligeables à température ambiante [95–97].

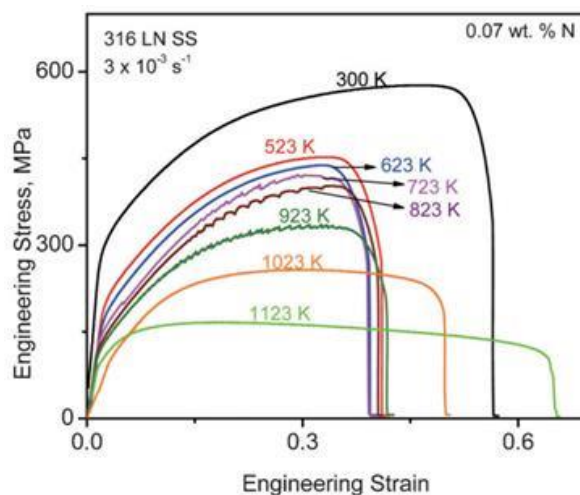


Figure 1.14 Courbes de traction pour un polycristal de 316L(N) à différentes températures [98]

« Tensile curves of a polycrystalline of 316L(N) SS at different temperatures [98] »

Les structures de dislocations apparaissent de manière similaire à celles observées à température ambiante : glissement planaire en stade I, puis développement d'une structure plus hétérogène [18,92,99–101]. On note cependant l'augmentation de la température favorise l'activation du glissement dévié et réduit le domaine de déformation plastique du stade I.

Bouchou et Delobelle [71,102] montrent à partir d'essais de traction par paliers croissants ou décroissants de température que les niveaux de contrainte en traction sont identiques, quel que soit l'historique de température (Figure 1.15). Un effet d'histoire en température n'est donc pas observé en traction. Ce matériau présente une pente d'écroutissage très similaire pour les différentes températures entre 293K et 823K (Figure 1.14 et Figure 1.15).

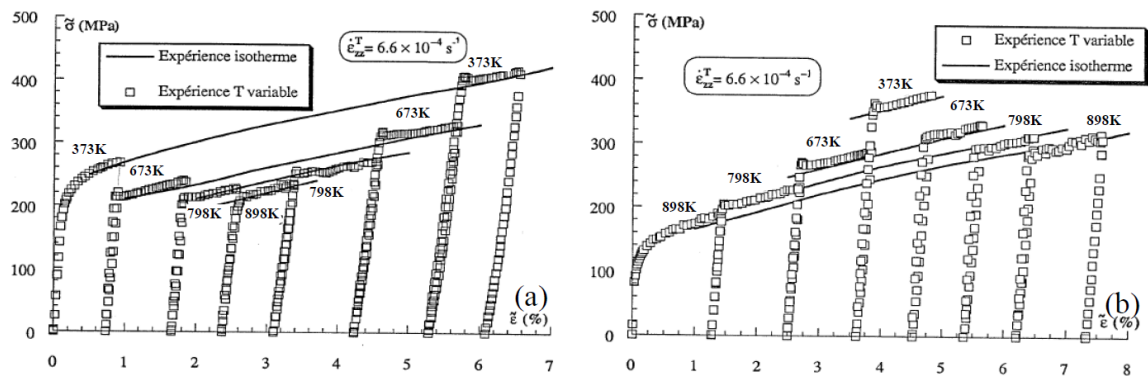


Figure 1.15 Courbes de traction en contrainte vraie-déformation vraie à différents paliers de température pour un acier 17-12 SPH [102].

« Tensile curves in true true-strain stress at different temperature ranges for a 17-12 SPH steel [102]. »

1.4.2 Effet Bauschinger

Lors d'un premier cycle de chargement en traction/compression sur un monocristal d'acier 316L, Gorlier [103] met en évidence un effet Bauschinger : la contrainte d'écoulement en retour est en valeur absolue inférieure, à celle du premier chargement. L'effet Bauschinger est observé sur les différents métaux CFC, indépendamment de la déformation plastique appliquée [104–107].

De nombreuses études relie l'effet Bauschinger à l'apparition d'une contrainte interne à longue distance, induite par l'existence d'hétérogénéités liées aux microstructures de dislocations. La diminution de la contrainte d'écoulement en retour est attribué à la dissolution lors de la décharge des structures de dislocations polarisées créés au chargement [88,108–110].

En effet, la déformation plastique d'un cristal peut entraîner une contrainte non-uniforme à travers la zone utile. Cette contrainte peut être répartie dans une contrainte à courte portée, τ_{eff} , agissant sur les dislocations individuelles, et une contrainte interne à longue

distance ou « *back stress* », \mathbf{x} , qui agit à des échelles plus longues, comme celle caractéristique de la microstructure des dislocations [111] :

$$|\tau - \mathbf{x}| = \tau_{eff} \quad \text{Équation 1.6}$$

Toutefois, la relation existante entre l'effet Bauschinger et la dissolution d'une microstructure de dislocation bien définie est contestable. En effet, il est montré expérimentalement dans le cas de monocristaux de cuivre que dès le premier cycle que $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$, même aux faibles amplitudes de déformation plastique [43,108]. L'écroissage cinématique est observée également pour des métaux CFC présentant une plus faible valeur de $\gamma_{SFE}/\mu b$, telle que Cu16%Al [112,113], le Cu30%Zn [105,114,115] et le 316L [103,107], caractérisés par des structures de dislocations plutôt planaires.

L'une des premières explications physiques de l'effet Bauschinger est basée sur les empilements de dislocations (*pile-ups*) (Figure 1.16) [116,117]. Les « piles-ups » conduisent à des forte contrainte locales, τ_p , entre les dislocations. Lors de l'inversion de la direction de chargement, ces contraintes assistent au glissement des dislocations. Il en résulte dans la diminution de la contrainte nécessaire pour réinitialiser la déformation plastique en sens inverse [117,118].

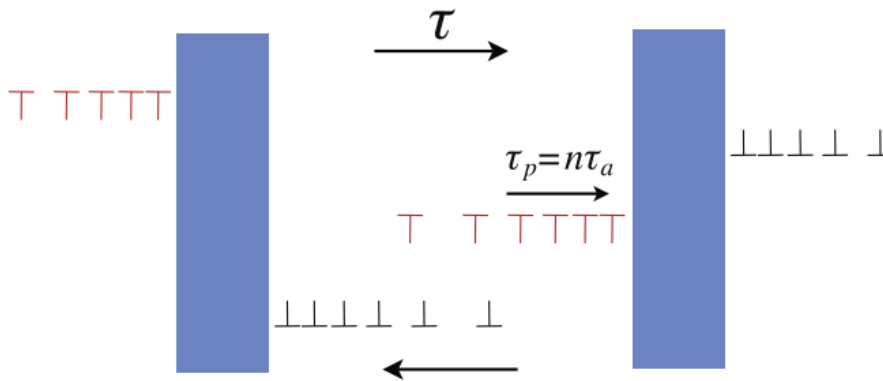


Figure 1.16 Empilements de dislocation idéalisés, stockée contre les joints de grains. L'équilibre de forces suggère une « *back stress* » égale de signe opposé [118].

« Dislocation pile-ups blocked by grain boundaries. Equilibrium suggests an equal “*back stress*” of opposite sign [118]. »

D'autres auteurs attribuent l'effet Bauschinger au glissement dans le sens inverse des dislocations [105,106,119,120]. Lorsqu'une dislocation se courbe (mécanisme de *bowing-out*), une « force de rappel » tend à la ramener droite afin minimiser la quantité d'énergie stockée. A cette force il est associé une tension de ligne qui s'oppose au mouvement des dislocations. La contrainte \mathbf{x} agissant sur le système de glissement est donné en fonction de la tension de ligne (Figure 1.17) [121,122]. La limite d'élasticité lors du chargement en retour (mécanisme de *bowing-in*), dépend donc d'une balance entre la contrainte critique

ou de frottement, τ_0 , et la contrainte de « backstress », χ [123]. Des résultats récents en dynamique des dislocations permettent de retrouver $\tau_0 \approx \chi$ [124,125].

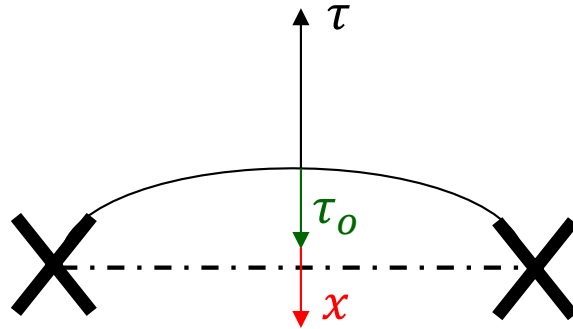


Figure 1.17 Équilibre entre les contraintes agissant sur une dislocation ancrée.

« Balance between the stresses acting on a pinned dislocation »

Les mécanismes d'annihilation des dislocations jouent également un rôle important sur l'effet Bauschinger [105,120,126]. Lorsque la direction de chargement est inversée, favorisant l'annihilation des dislocations de signe opposé, la réduction du nombre de dislocations dans le matériau réduit la résistance pour réinitialiser la déformation plastique [111,127].

Yaguchi et Margolin [128] montrent que l'effet Bauschinger est plus important dans un bicristal que dans un monocristal. En effet, dans le cas des polycristaux, des incompatibilités intergranulaires sont également à l'origine de l'effet Bauschinger [84,88,129]. Dans les polycristaux, les grains ne se déforment pas tous de la même façon à cause de leurs orientations variables. Ceci peut induire à des hétérogénéités dans le matériau, capables d'affecter l'effet Bauschinger en créant une contrainte interne à longue distance d'origine intergranulaire.

1.4.3 Comportement en sollicitation de déformation cyclique

1.4.3.1 Evolution de l'amplitude de contrainte en fonction du nombre de cycles

Au cours des cycles symétriques de traction-compression à amplitude de déformation imposée, la contrainte maximale et l'amplitude de contrainte évoluent. La Figure 1.18 présente l'effet de la température sur l'évolution de l'amplitude de contrainte en traction-compression symétriques à amplitude de déformation imposée. Dans le cas de l'acier 316L(N), trois étapes peuvent être observées lors d'un essai à une amplitude de déformation imposée : la première est caractérisée par un durcissement du matériau, suivi d'une étape d'adoucissement et, finalement, une étape de stabilisation. Ce comportement est observé dans le cas des monocristaux [103,107] et des polycristaux [3,16,77,130–132].

La première étape de durcissement se caractérise principalement par la multiplication de dislocations. En général, cette étape représente une fraction relativement faible de la durée de vie du matériau en fatigue [133,134]. L'adoucissement serait caractérisé la formation de faibles zones de densités de dislocations, ce qui rendrait plus favorable le glissement des dislocations, entraînant une diminution de la contrainte d'écoulement [131,133]. La dernière étape de stabilisation, est caractérisée par une compétition entre les mécanismes de multiplication et d'annihilation des dislocations [107,131,133]. La phase d'adoucissement n'est pas observée pour une température supérieure à 800 K [3,77,103] (Figure 1.18).

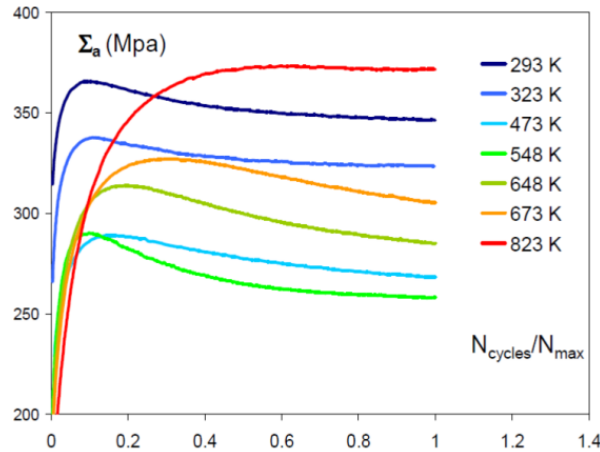


Figure 1.18 Effet de la température sur l'évolution de l'amplitude de contrainte en fonction du nombre de cycles, acier 316L(N), sollicité en déformation cyclique à $E_a^p = \pm 0,4\%$ et $\dot{E} = 4.10^{-3} s^{-1}$ [3].

« Effect of the temperature on the evolution of the cyclic stress amplitude. 316L(N) SS, cyclic strain controlled test at $E_a^p = \pm 0,4\%$ and $\dot{E} = 4.10^{-3} s^{-1}$ [3]. »

La Figure 1.18 montre que l'amplitude de la contrainte maximale diminue avec la température lors des chargements cycliques entre 293 K et 548K. Ce comportement peut être justifié par une augmentation des mécanismes de glissement thermiquement activés des dislocations [135]. Pour des températures plus élevées (entre 548 K et 823 K), cet effet s'inverse et l'amplitude de contrainte augmente avec la température. Un comportement similaire a été observé expérimentalement dans le cas d'un monocristal orienté en glissement simple d'acier 316L [103]. Ce phénomène est en partie attribué au vieillissement dynamique en lien avec la diffusion des atomes interstitiels, lors du DSA1, ou des atomes substitutionnels, lors du DSA2 [74,77,136].

L'effet de l'amplitude de déformation sur l'évolution de l'amplitude de contrainte pour l'acier 316L(N) à 293 K et à 823 K, est présenté sur la Figure 1.19. Indépendamment de la température, l'augmentation de l'amplitude de déformation cyclique résulte dans un durcissement cyclique plus large et dans un niveau de contrainte stabilisée plus élevée [134,137].

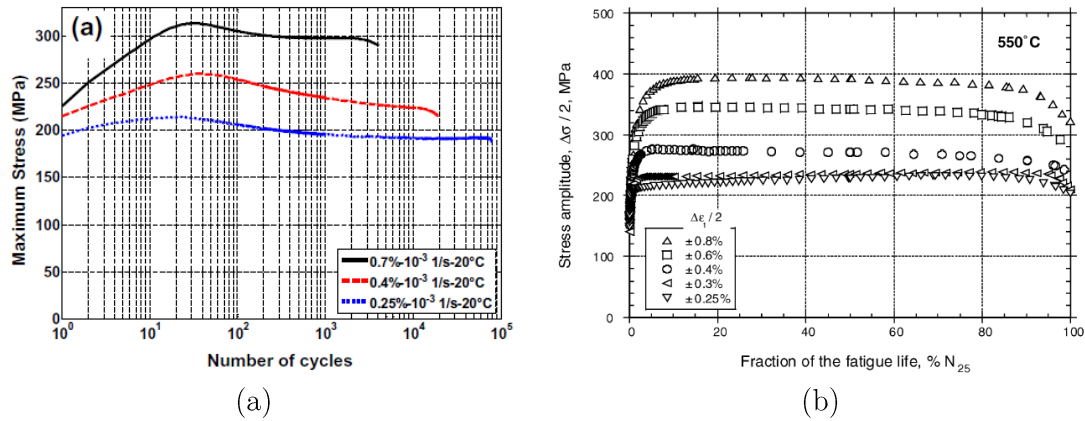


Figure 1.19 Evolution de l'amplitude de contrainte pour des essais à différentes amplitudes de déformation. Acier 316L(N), (a) à 293 K [134] et (b) à 823 K [137].

« Stress amplitude evolution for symmetric tests at different strain amplitudes. 316L (N) SS, (a) at 293 K [134] and (b) at 823 K, [137]. »

1.4.3.2 Evolution des structures de dislocations en fonction du nombre de cycles

L'orientation cristalline et l'énergie de faute d'empilement jouent des facteurs prédominant sur les structures de dislocations créées dans le cas des métaux CFCs lors des sollicitations cycliques [45,138]. Des cristaux orientés en glissement simple (axe de sollicitation proche du centre du triangle standard) sont connus pour présenter des bandes de glissement persistantes (BGP ou PSB – *persistent slip band*) du type « *ladder-like* ». Lorsque l'axe de traction-compression est proche de l'axe [011] les monocristaux ont tendance à former des BGP de type murs. Les cristaux dont les axes cristallographiques [001] ou [111] sont proches de l'axe de la sollicitation cyclique présentent des veines/cellules de dislocations et des structures de type labyrinthes (Figure 1.20).

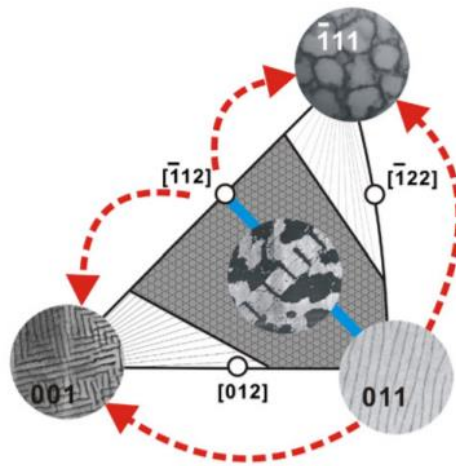


Figure 1.20 Principe général de l'effet de l'orientation sur les arrangements de dislocation, en chargements uniaxial de traction-compression [138]

« General principle of the effect of orientation on dislocation arrangements, under uniaxial tension-compression loadings [138] »

A partir d'observations de la surface de l'acier 316L(N) déformé cycliquement à 293 K, Man *et al.* [139] montrent que le glissement simple est prédominant. Ces auteurs montrent que 70% des grains sont en glissement simple après chargement cyclique à une amplitude de déformation plastique $E_a^p = \pm 0.1\%$. Des observations en MET montrent qu'à basse température (entre 293 K à 523 K), le matériau présente une structure de caractère plutôt planaire, avec la présence d'amas de dislocations et des murs polarisés (Figure 1.21a) [41,133,134].

Toutefois, Gerland *et al.* [41] et Pham *et al.* [131] ont montré que les structures de dislocations produites lors des chargements cycliques, dans cet intervalle de température, sont largement dépendantes de l'amplitude de déformation. Une structure de dislocations plus hétérogène peut se développer dans certains grains aux plus fortes amplitudes de déformation plastique ($E_a^p > \pm 0.5\%$), induisant un durcissement cyclique plus important (Figure 1.21b).

Pham *et al.* [63,131] montrent que dans le domaine du DSA1 (température entre 573 K et 723 K), l'activation du glissement dévié est retardée. La structure de dislocations devient plus homogène, avec l'apparition d'empilements de dislocations (pile-ups). Dans cette gamme de température, Gerland *et al.* [64,140] observent aussi la présence d'une nouvelle structure, appelée Corduroy (Figure 1.22), au caractère durcissant.

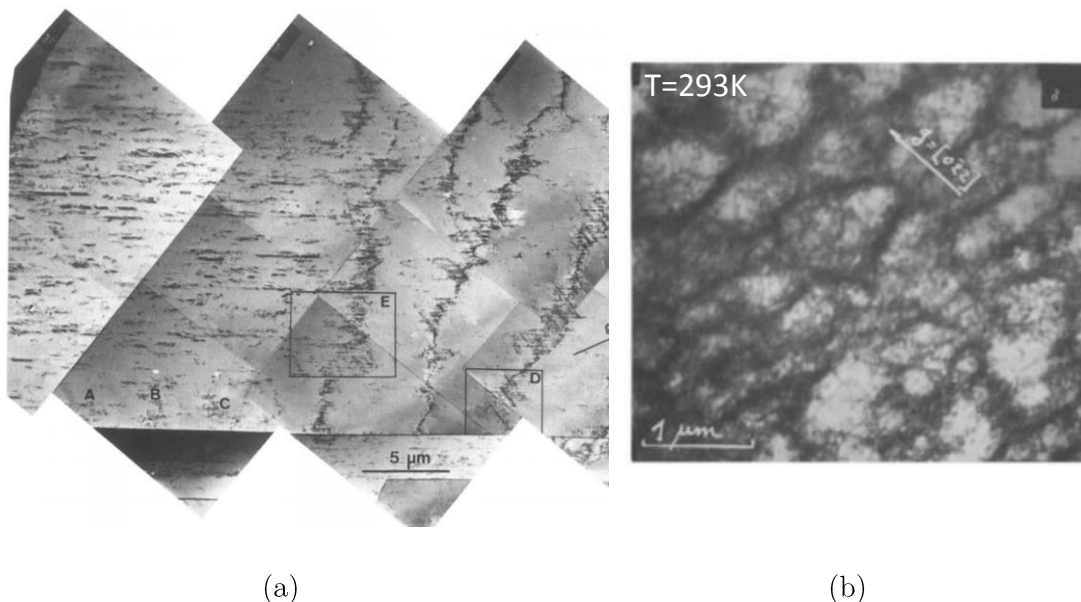


Figure 1.21 (a) Structure de dislocations planaire en cours de développement dans une structure de type mur dans un acier 316L(N) à 293K, $E_a^p = \pm 0.1\%$ (Li and Laird, 1994b). (b) Cellules de dislocations pour un alliage de 316L(N) à 293K, $E_a^p = \pm 0.5\%$ [141].

« (a) Planar dislocations in process of developing into wall structure in a 316L(N) SS at 293K, $E_a^p = \pm 0.1\%$ (Li and Laird, 1994b). (b) Dislocation cells in a 316L(N) SS at 293K, $E_a^p = \pm 0.5\%$ [141]. »

À température plus élevée, lors du DSA2, entre 773 K et 873 K, l'activation thermique du glissement dévié favorise la formation d'une structure de type murs-canaux après quelques

cycles, même aux faibles amplitudes de déformation [64]. Au cours de la déformation cyclique, cette structure tend à se développer rapidement conduisant à une structure cellulaire bien définie (Figure 1.23a). A 873K des structures de bandes de glissement persistantes et de labyrinthes bien structurés [64,141] peuvent également être observés, suivant l'orientation du grain et de ses voisins [142] (Figure 1.23b,c).

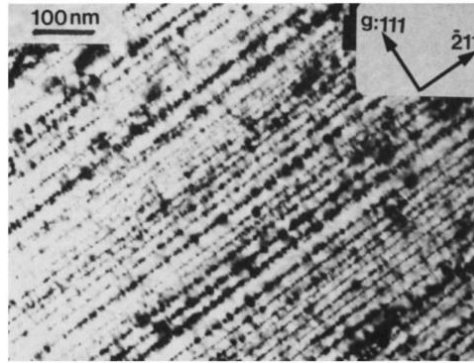
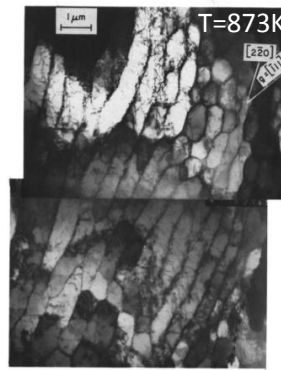
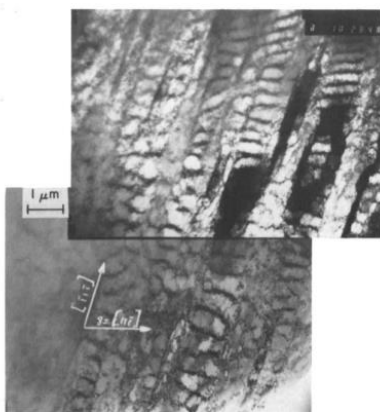


Figure 1.22 Structure de Corduroy. Acier 316L(N) à 673 K, $E_a^p = \pm 0.2\%$ [140].

« Corduroy structure .316L (N) SS at 673 K, $E_a^p = \pm 0.2\%$ [140] »



(a)



(b)



(c)

Figure 1.23 (a) Cellules et murs de dislocations (b) structure de type « ladder-like PSB » et (c) labyrinthes.

Acier 316L(N) à 873K, $E_a^p = \pm 0,5\%$ [141].

« (a) Dislocation cells, (b) « ladder-like PSB » structure and (c) labyrinths. 316L(N) SS at 873K, $E_a^p = \pm 0,5\%$ [141]. »

1.4.3.3 Effet de la vitesse de chargement sur la microstructure de dislocations

A température élevée, Catalao [143] a mis en évidence l'effet de la vitesse de déformation sur la microstructure de dislocations dans le domaine de sensibilité inverse à la vitesse de déformation (c.f. Section 1.3.2). Il apparaît qu'un chargement à une vitesse de déformation faible favorise la formation des cellules des dislocations à 823K. Dans ce cas, il est possible d'observer une microstructure caractérisée principalement par des cellules de dislocations (Figure 1.24). Lorsque la vitesse de déformation est plus élevée, la microstructure de dislocations est plutôt homogène aux faibles amplitudes de déformation (Figure 1.24a). Toutefois, des cellules de dislocations sont observées majoritairement dans les grains lorsque l'amplitude de déformation plastique est plus élevée (Figure 1.24b). Des constatations similaires ont aussi été faites par d'autres auteurs [144,145].

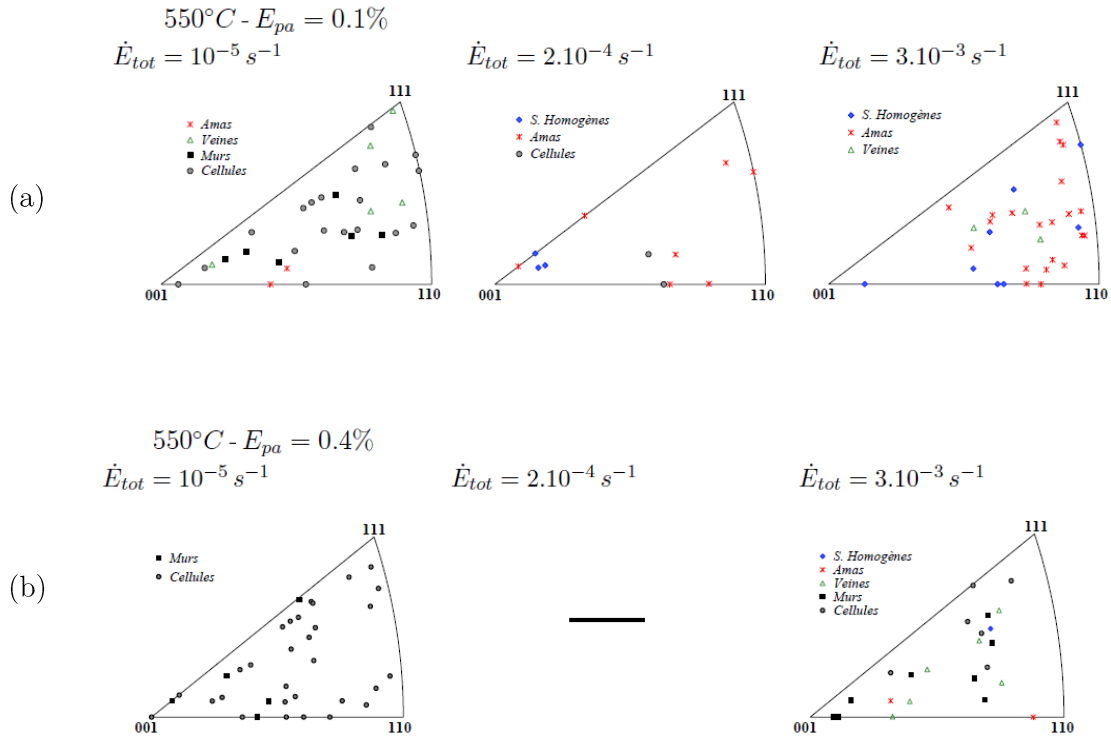


Figure 1.24 Effet de la vitesse de déformation : représentation des principales microstructures de dislocations observés dans les grains en fonction de la position de l'axe de sollicitation dans le triangle standard pour la température de 823K et (a) $E_a^p = \pm 0,1\%$ et (b) $E_a^p = \pm 0,4\%$ [143].

« Effect of the strain rate: representation in the standard triangle of the main dislocation patterns observed at 823K for (a) $E_a^p = \pm 0,1\%$ and (b) $E_a^p = \pm 0,4\%$ [143]. »

1.4.4 Comportement de rochet uniaxial

Le rochet ou déformation progressive résulte de la superposition de deux chargements : un chargement constant (de contrainte moyenne, Σ_m) et un chargement cyclique (d'amplitude de contrainte, Σ_a). Lorsque ces chargements sont appliqués sur une structure trois types de comportements sont observés (Figure 1.25) :

- L'incrément de déformation cyclique disparaît avec le nombre de cycles et le matériau se stabilise avec un comportement élastique, on parle d'adaptation ;
- L'incrément de déformation disparaît avec le nombre de cycles et une déformation élasto-plastique cyclique subsiste au cycle stabilisé, on parle d'accommodation ;
- Un accroissement de la déformation se produit à chaque cycle de chargement jusqu'à la rupture du matériau, on parle de rochet ou déformation progressive.

Dans une étude détaillée sur la déformation progressive uniaxiale de l'acier 316L(N), Feaugas et Gaudin [146,147] ont montré l'influence de la contrainte moyenne et de la contrainte maximale sur la vitesse de rochet (dE_r/dN). Ces auteurs ont observé deux phases d'évolution de la vitesse de rochet en fonction du nombre de cycles : une phase « transitoire », où la vitesse de rochet varie, et une phase dite de « rochet asymptotique », où la vitesse de rochet a tendance à se stabiliser.

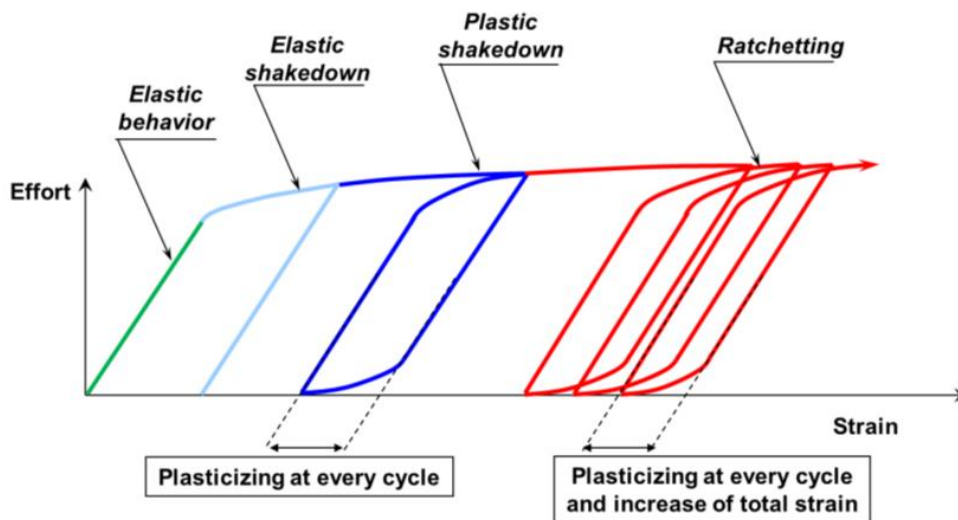


Figure 1.25 Schématisation des trois types de comportement pour un chargement cyclique à contrainte moyenne non nulle : adaptation élastique, accommodation élasto-plastique et rochet .

« Types of behavior for a non-zero average stress loading, showing elastic shakedown, elastic-plastic shakedown and ratcheting. »

La Figure 1.26 montre l'influence de la contrainte moyenne sur la vitesse de rochet stabilisée pour différentes contraintes maximales. Une vitesse de rochet maximale est atteinte pour une contrainte moyenne $\Sigma_m \sim 50MPa$ et deux domaines (A, faible contrainte moyenne et B, forte contrainte moyenne) peuvent être définis. Pour une même contrainte moyenne ($\Sigma_m = 50 MPa$), Feaugas et Gaudin [146] montrent que la déformation progressive augmente d'autant plus vite que la contrainte maximale est importante (Figure 1.26b).

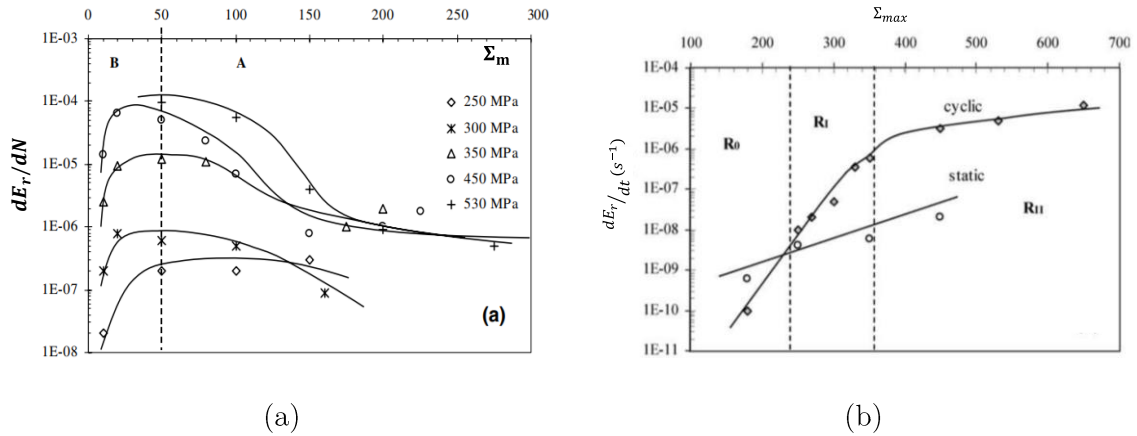


Figure 1.26 (a) Évolution de la vitesse de rochet en stade stabilisé (dE_r/dN) en fonction de la contrainte moyenne pour différentes contraintes maximales. (b) Vitesse de rochet en stade stabilisé (dE_r/dt) en fonction de la contrainte maximale, Σ_{max} ($\Sigma_m = 50 MPa$). Acier 316L(N) à température ambiante [146].

« (a) Steady-state ratcheting rate (dE_r/dN) as a function of mean stress Σ_m for different peak stresses (b) Steady-state ratcheting rate (dE_r/dt) as a function of peak stress Σ_{max} ($\Sigma_m = 50 MPa$). 316L(N) SS at RT[146]. »

Gaudin et Feaugas [147] ainsi que Kang *et al.* [89] associent la vitesse de rochet à la création/dissolution à chaque cycle d'une structure hétérogène de dislocations polarisées. Ces structures créées les phases de chargement sont partiellement déstabilisées lors du changement de sens du chargement. Au début de la décharge, la densité de dislocations dans les zones « dures » est fortement réduite, tandis qu'une diminution plus faible est observée dans les zones « molles » (Figure 1.27). La fraction de structures hétérogènes redevient importante au fur et à mesure que la sollicitation en compression augmente et les structures polarisées sont en partie recrées.

Selon ces auteurs, la contrainte moyenne a un effet important sur la création/dissolution de la structure de dislocations polarisées [89,90,147]. La fraction de grains présentant des structures polarisées est maximale pour $\Sigma_m = 50 MPa$ (Figure 1.26b). Pour une contrainte moyenne plus faible, la fraction des grains présentant des structures polarisées tend à diminuer au profit d'une augmentation de la proportion de dipôles. Pour une contrainte moyenne plus élevée, la dissolution des structures polarisées de dislocations ne se produit que partiellement en raison de la faible déformation plastique en retour. Selon Feaugas et Gaudin [146], les structures dipolaires plus stables que les structures polarisées, ne seraient pas favorables au rochet cyclique.

Pour Gaudin et al.[146], le rochet cyclique ne semble être actif que lorsque le glissement dévié est présent, ce qui est favorisé par une forte valeur de $\gamma_{SFE}/\mu b$ du matériau. Cette observation est confirmée par Sakaki *et al.* [29] et Kang *et al.* [148], qui ont montré, en utilisant des métaux/alliages de différentes $\gamma_{SFE}/\mu b$, qu'une valeur de $\gamma_{SFE}/\mu b$ plus importante favorisait le rochet.

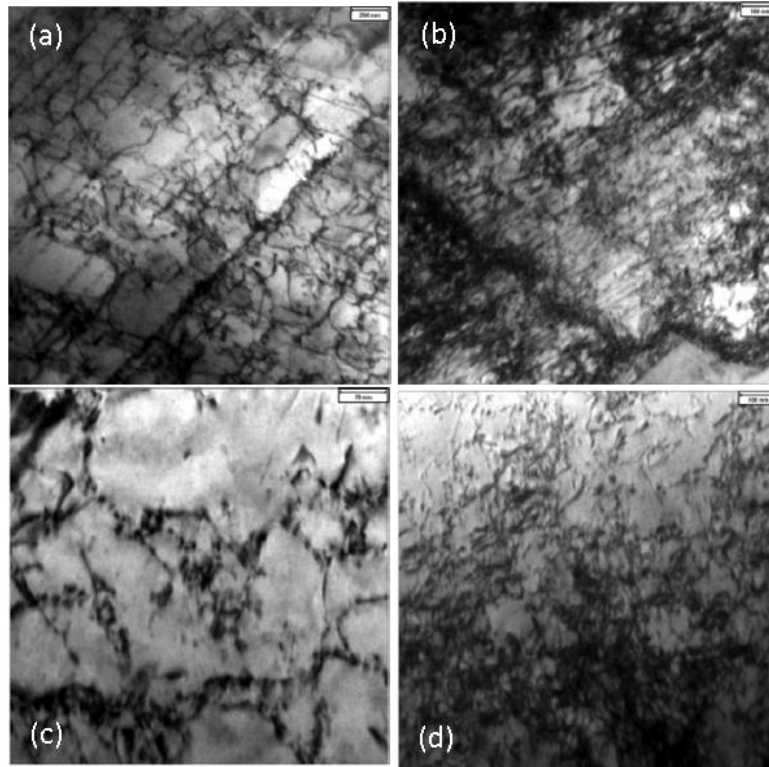


Figure 1.27 Structure de dislocation présente lors du premier quart de cycle ($\Sigma = 420 \text{ MPa}$) - (a) lignes de dislocation et (b) amas de dislocation - et du troisième quart de cycle ($\Sigma = -280 \text{ MPa}$) - (c) lignes de dislocations et (d) dissolution des amas de dislocation. Acier 316L(N) à température ambiante, sollicité à $\Sigma = 70 \pm 350 \text{ MPa}$ [89]

« Dislocation patterns observed during the first quarter of cycle ($\Sigma = 420 \text{ MPa}$) - (a) dislocation lines and light dislocation tangles and (b) heavy dislocation tangles - and third quarter of cycle ($\Sigma = -280 \text{ MPa}$) - (c) light dissolved dislocation tangles and (d) dissolved heavy dislocation tangles. 316L (N) steel at RT, ratcheting test, $\Sigma = 70 \pm 350 \text{ MPa}$ [89] »

Cependant, comme cela a été mis en évidence pour l'effet Bauschinger, le rochet cyclique peut aussi être observé dans l'absence d'une structure de dislocations bien établie. En effet, comme cela est montré à la Figure 1.27, la déformation progressive peut être reliée à la décroissance de la densité des dislocations lors de la décharge. Cette décroissance peut apparaître, indépendamment d'une structure polarisée de dislocations, par la capacité des dislocations à glisser en retour lors du changement de direction du chargement [89,119] et par les mécanismes d'annihilation des dislocations de signes opposés [126].

Taleb [96] a étudié l'effet du comportement visqueux du matériau sur la déformation progressive. Dans le cas de l'acier 316L à température ambiante, les résultats présentés sur la Figure 1.28, indiquent que la déformation progressive augmente significativement avec un temps de maintien à la contrainte maximale. Selon Taleb, le fluage constituerait le mécanisme prépondérant de la déformation inélastique accumulée, même à température ambiante. Yu *et al.* [97] confirment le comportement visqueux du matériau à la température ambiante à partir d'essais de rochet à différentes vitesses de chargement (Figure 1.29). La déformation progressive tend à diminuer avec l'augmentation de la vitesse de chargement.

Ce même comportement est également observé pour un alliage d'acier inoxydable 304L [95,149].

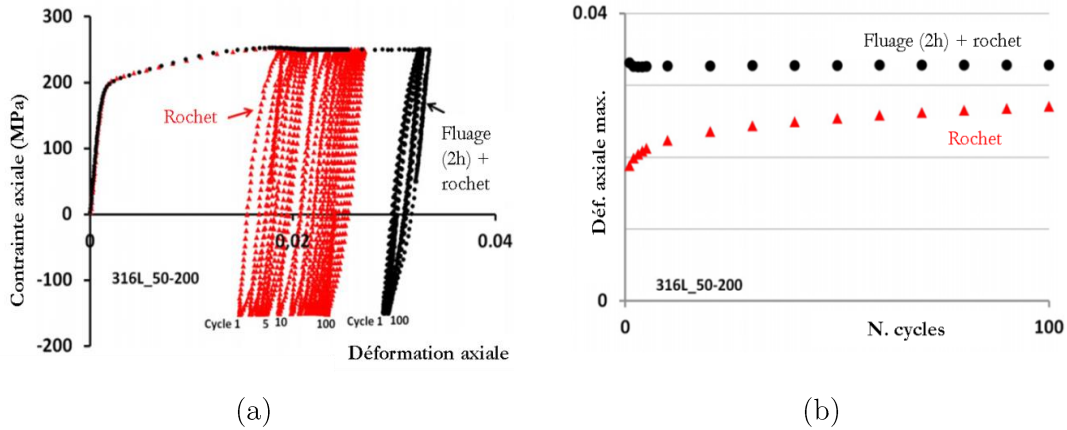


Figure 1.28 Evolution de la contrainte et de la déformation axiale pour un « essai de rochet » et un « essai de fluage (2h)+rochet » pour l'acier 316L (a) contrainte axiale vs. déformation axiale; (b) déformation axiale maximale vs. nombre de cycles [96].

« Stress and axial strain evolution for a "ratcheting test" and a "creep (2h) + ratcheting test" for 316L SS. (a) stress-strain curve; (b) Axial strain evolution [96].»

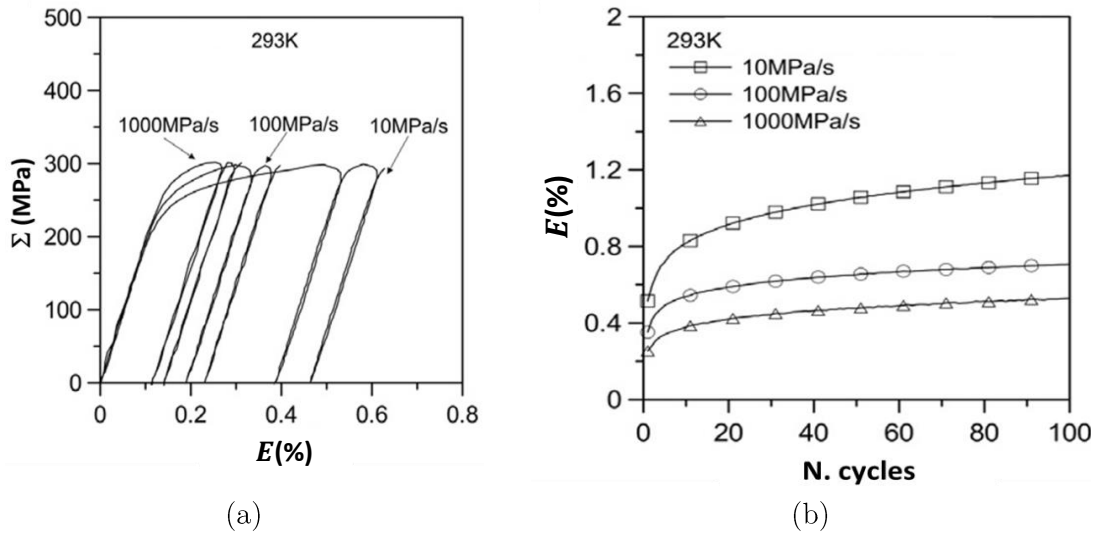


Figure 1.29 (a) Courbes contrainte-déformation en rochet uniaxial ($\Sigma = 150 \pm 150$ MPa) et (b) évolution de la déformation progressive avec le nombre de cycles pour différents vitesses de chargement ($\dot{\Sigma}$), 316L(N) à 293 K (Yu et al., 2012a).

« (a) Stress-strain curve for a loading of $\Sigma = 150 \pm 150$ MPa and (b) Ratcheting strain evolution for different stress rates ($\dot{\Sigma}$), 316L(N) SS at 293 K (Yu et al., 2012a)

A température élevée, la déformation de rochet évolue en fonction du nombre des cycles de la même manière qu'à température ambiante : une phase transitoire suivie par une phase à vitesse stabilisée [15,18,93]. Dans le domaine de température où le DSA n'est pas activé, la vitesse de rochet pour une même contrainte maximale appliquée ne dépend pas de la température.

Dans le domaine de température correspondant au premier régime du DSA, le glissement devient plus planaire, en raison de la diffusion des atomes interstitiels (entre 473 K et 723 K), selon le mécanisme de Suzuki. En conséquence, le vieillissement dynamique limiterait la formation des structures hétérogènes polarisées associé à la déformation progressive [18,90,150].

Gaudin [18] montre que la déformation de rochet a également tendance à diminuer dans le domaine de température correspondant au deuxième régime du DSA (entre 723 K et 873 K), en accord avec les études de Delobelle *et al.* [151] et Sarkar *et al.* [15]. Catalao *et al.* [35] et Gentet [3] observent la formation d'une structure hétérogène lors des chargements cycliques à contrainte moyenne nulle, mais avec un caractère plutôt dipolaire. Ces observations pourraient expliquer la diminution de la déformation progressive dans le deuxième régime du DSA.

1.4.5 Effet du temps de maintien en fatigue-fluage et fatigue-relaxation

L'effet du temps de maintien sur le comportement cyclique de l'acier 316L(N) à haute température a été largement étudié. Dans ce type de chargement, une phase de maintien à déformation constante est introduite à chaque cycle, en traction et/ou en compression. Un fort effet du temps de maintien est observé sur le comportement cyclique du matériau. La Figure 1.30 présente l'évolution de l'amplitude de contrainte (Σ_a) en fonction du nombre de cycles pour différents temps de maintien (en traction), pour l'acier 316L(N) à 823K déformé cycliquement à $E_a = \pm 0.3\%$.

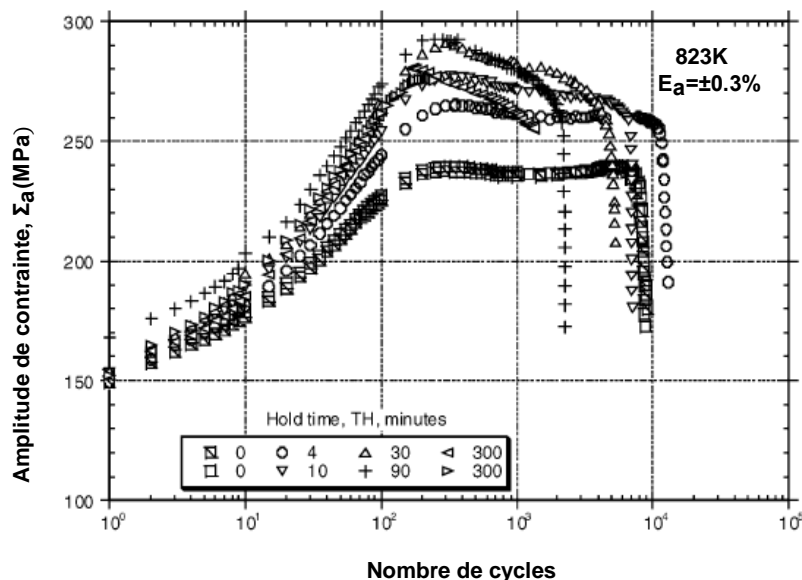


Figure 1.30 Evolution de l'amplitude de la contrainte pour différents temps de maintien. Acier 316L(N), $E_a = \pm 0.3\%$, 823K [137].

« Cyclic stress amplitude response for different holding times. 316L(N) SS, $E_a = \pm 0.3\%$, 823K [137]. »

Sauzay et al. [137] observent une évolution de l'amplitude de contrainte plus rapide en fatigue-relaxation qu'en fatigue pure. Cet effet est communément observé dans le deuxième intervalle de température du DSA (entre 773K et 873K), à différentes amplitudes de déformation plastique [73,137,152]. L'effet de la durée du maintien sur le durcissement ou l'adoucissement cyclique (rapport $\Sigma_{max,th}/\Sigma_{max,0}$) est mis en évidence sur Figure 1.31 pour l'acier 316L(N). Des temps de maintien courts induisent un durcissement cyclique plus prononcé ($\Sigma_{max,th}/\Sigma_{max,0} > 1$), alors que les temps de maintien plus long induisent un durcissement cyclique plus faible (rapport $\Sigma_{max,th}/\Sigma_{max,0} < 1$).

La température joue un rôle important sur le temps caractéristique de transition durcissement/adoucissement. Pour une amplitude de déformation imposée $E_a = \pm 0.25\%$, la transition entre les régimes de durcissement/adoucissement se situe vers 30 minutes à 873K (Figure 1.31b), alors qu'à 823K (Figure 1.31a) le durcissement est observé jusqu'à 300 minutes de temps de maintien [137]. À 773K, Rachdi [153] n'observe qu'une phase de durcissement pour des temps de maintien inférieurs à 3000 minutes. Ce décalage s'explique par le fait que l'activation thermique des mécanismes de viscoplasticité et de restauration est moins influant à température plus basse. Pour de faibles amplitudes de déformation, seul un sur-durcissement cyclique est observé sur tout le domaine du temps de maintien exploré.

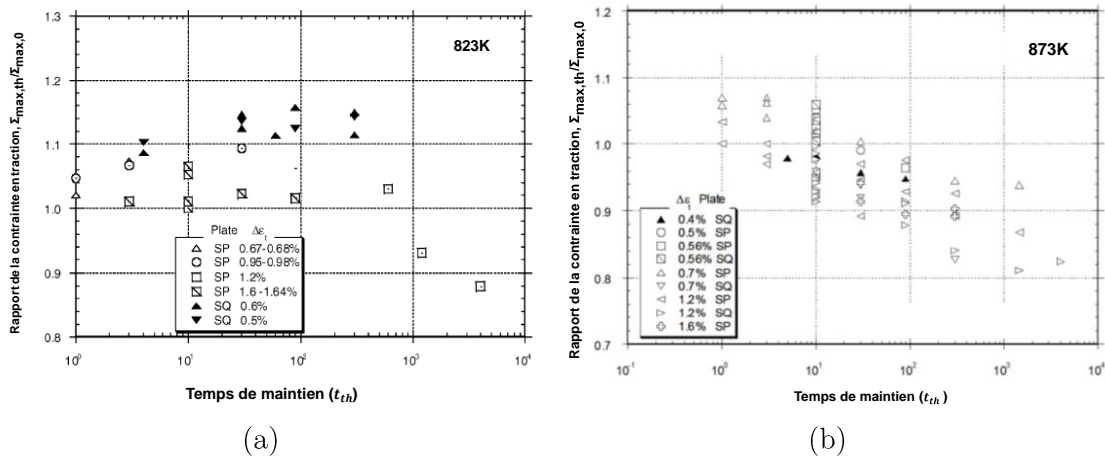


Figure 1.31 Rapport entre les contraintes à mi-durée de vie, avec le temps de maintien ($\Sigma_{max,th}$) et sans le temps de maintien ($\Sigma_{max,0}$), tracé en fonction du temps de maintien pour un acier 316L(N). À (a) 823K et (b) 873K [137].

« Ratio between mid-life stress with hold time ($\Sigma_{max,th}$) and without hold time ($\Sigma_{max,0}$) plotted against hold time for a 316L(N) SS. At (a) 823K and (b) 873K [137]. »

Pour un acier 316L(N) à 873K, Tavassoli [152,154] a montré que la densité de dislocations diminue avec l'augmentation du temps de maintien, ainsi que la fraction des structures de dislocations traditionnellement observées en fatigue pure à température élevée (murs, labyrinthes, cellules). La structure de dislocations est de moins en moins définie avec l'augmentation du temps de maintien, évoluant d'une configuration cellulaire à une

structure d'amas de dislocations (Figure 1.32) [73,137]. Lors du temps de maintien, l'activation thermique favorise aussi la diffusion des lacunes, induisant l'annihilation des dipôles et des boucles prismatique par le mécanisme de montée des dislocations [36].

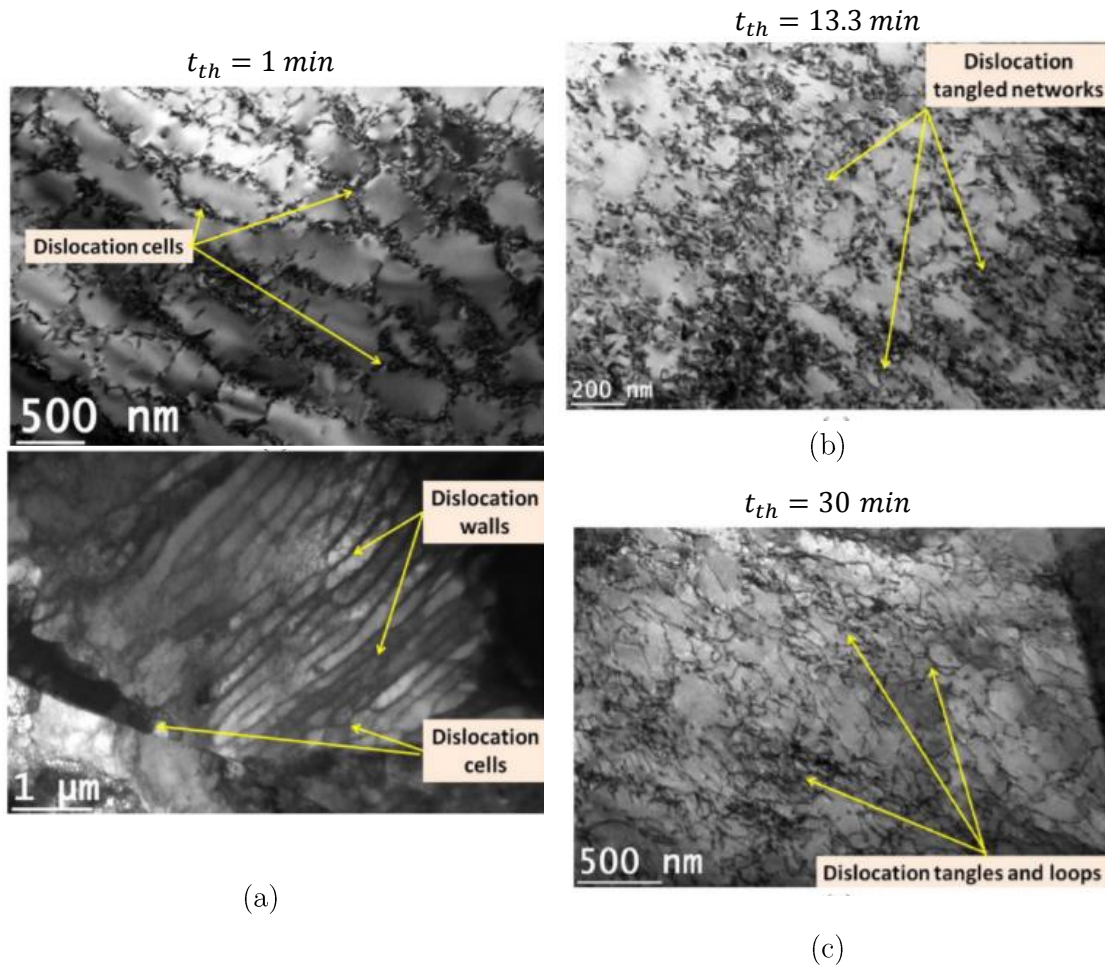


Figure 1.32 Microstructures de dislocation observées après un essai de fatigue-relaxation pour un acier 316L(N) à $E_a = \pm 0.6\%$, $\dot{E} = 3.10^{-3} s^{-1}$, $T = 823K$ et différents temps de maintien : (a) 1 minute, (b) 13.3 minutes et (c) 30 minutes [73].

« Dislocation microstructures observed after fatigue-relaxation tests in a 316L(N) SS at $E_a = \pm 0.6\%$, $\dot{E} = 3.10^{-3} s^{-1}$, $T = 823K$ and different holding times: (a) 1 minute, (b) 13.3 minutes and (c) 30 minutes [73]. »

1.5 Conclusion

Le comportement mécanique des aciers austénitiques inoxydables 316L(N) a été étudié en traction, en fatigue, en rochet ainsi qu'en fatigue-relaxation, à température ambiante et à haute température.

Dans l'objectif de développer une modélisation polycristalline du comportement monotone et cyclique de l'acier 316L(N) à température élevée, nous retiendrons principalement de cet état de l'art que :

- Lors du premier chargement en traction, le comportement plastique des grains dépend fortement de l'orientation cristalline par rapport à l'axe de sollicitation.

Dans le cas des polycristaux d'acier 316L(N) à température ambiante, la faible valeur de $\gamma_{SFE}/\mu b$ favorise le glissement planaire de sorte qu'une unique trace de glissement est observée dans la surface de la majorité des grains, même à des fortes déformations plastiques.

- L'augmentation de la température réduit le champ du glissement planaire et le glissement dévié est favorisé. A température plus élevée, le vieillissement dynamique affecte fortement le comportement de l'acier 316L(N).
- L'effet Bauschinger observé lors de la première inversion du chargement est relié l'apparition de contraintes internes à longues distances. La diminution de la contrainte d'écoulement en retour peut être attribuée à la dissolution des structures de dislocations polarisées créées au chargement, mais également à la réversibilité du glissement des dislocations lors de la décharge et aux mécanismes d'annihilation de dislocations. À l'échelle du polycristal, les hétérogénéités de déformation viscoplastique entre grains jouent aussi un rôle important en créant des contraintes internes d'origine intergranulaire ;
- Au cours des cycles suivants, lorsqu'une contrainte moyenne non nulle est imposée, une déformation progressive ou déformation de rochet peut apparaître. Il a été montré que pour une même contrainte maximale du cycle, la vitesse de rochet de l'acier 316L(N) à température ambiante est maximale pour une contrainte moyenne de 50MPa. Comme l'effet Bauschinger, la déformation progressive peut être associée au mécanisme de création/dissolution des structures de dislocations polarisées mais également à la réversibilité du glissement et à l'annihilation des dislocations de signe opposés ;
- En plus des mécanismes de déformation actifs à température ambiante (glissement des dislocations, interaction entre dislocations, multiplication et annihilation des dislocations, création de dipôles), les mécanismes thermiquement activés (vieillissement dynamique, montée de dislocations, augmentation du glissement dévié) doivent également être pris en compte pour modéliser le comportement élasto-viscoplastique de l'acier 316L(N) dans le domaine de température d'intérêt ($723K < T < 823K$).

The mechanical behavior of austenitic 316L(N) stainless steels was studied under tensile, fatigue, ratcheting and fatigue-relaxation loading at room temperature and at high temperature.

The following conclusions are drawn from this review:

- *During the first tensile loading, the plastic behavior strongly depends on the crystalline grain orientation. In the case of polycrystalline 316L(N) SS at room*

temperature, the low value of $\gamma_{SFE}/\mu b$ favors planar slip, so that a single slip trace is observed in the surface of the majority of grains, even at high plastic strains.

- The temperature increasing reduces planar slip and favors wavy slip. At a high temperature, dynamic strain aging strongly affects the behavior of 316L(N) SS too.
- The Bauschinger effect observed during backward loading is related to the appearance of a long-range stress. At the dislocation microstructure scale, the yield strength dropping can be attributed to the dissolution of polarized dislocation microstructures, but also to the reversibility of dislocation gliding and the annihilation of dislocations. At the polycrystal scale, heterogeneities of viscoplastic deformation between grains also play an important role, resulting an intergranular long-range stresses;
- In the case of cycles loading, when a non-zero average stress is imposed, ratcheting may occur. For 316L(N) SS at room temperature, if the maximum stress is kept constant, the ratcheting rate is higher for a mean stress of 50MPa. As the Bauschinger effect, ratcheting can be associated with the dissolution of polarized dislocation microstructures, the reversibility of dislocation glide and the annihilation of dislocations;

In addition to activated mechanisms at room temperature (dislocations gliding, interaction between dislocations, multiplication/ annihilation of dislocation, creation of dipoles), the thermally activated mechanisms (dynamic aging, dislocation climb, cross-slip activation) must also be taken into account in the polycrystalline modeling of the 316L(N) SS elastic-viscoplastic behavior.

2 Assessment of elastic-viscoplasticity mean-field homogenization rules applied to FCC polycrystals

Dans ce chapitre, les prédictions de différents modèles d'homogénéisation à champs moyens sont comparées à celles des éléments finis (EF) à champs complets, considérés comme référence. Les modèles autocohérents proposés par Kröner et par Molinari sont appliqués. Un troisième modèle, dit Kröner-Secant, est proposé. Les réponses globales de ces modèles sont comparées sous différentes conditions de chargement et sur un large domaine de viscoplasticité cristalline. Dans un premier temps, une loi de comportement mécanique simple est considérée. Ensuite, des lois de durcissement sont ajoutées dans la loi de comportement. Les modèles sont évalués en fatigue et en déformation progressive. L'approche proposée (Kröner-Secant) semble être une bonne alternative à la représentation du comportement des matériaux polycristallins FCC. Dans les différents domaines de viscoplasticité testés, ce modèle conduit à une meilleure prédiction du comportement global monotone et en déformation cyclique en comparaison avec les calculs aux éléments finis. Cependant, pour un chargement cyclique en déformation progressive, ce modèle tend à surestimer la déformation viscoplastique après quelques cycles. Sur un domaine de sollicitation en déformation progressive bien défini, le modèle de Kröner est plus juste et nous proposons d'expliquer pourquoi.

In this chapter, the predictions of mean-field homogenization models are compared to those of full-field finite elements (FE), which are taken as reference results. The models proposed by Kröner and Molinari are applied. A third model, called Kröner-Secant, is proposed. The overall response of these models is assessed under different loading conditions in a large elasto-viscoplasticity domain. Firstly, basic crystal viscoplasticity laws are adopted. Then, hardening laws are introduced. The models are evaluated under monotonic (tensile, relaxation and creep) and cyclic (cyclic deformation and ratcheting) loadings. The proposed approach (Kröner-Secant) seems to be a reliable alternative to the representation of the behavior of FCC polycrystalline material, comparing to the conventional transition scale models. This model leads to a better prediction of the overall tensile and relaxation behavior in comparison with the FE calculations results. This approach leads also to rather accurate predictions for cyclic deformation. However, for ratcheting loadings, this model tends to overestimate the viscoplastic deformation after a few cycles. On a well-defined ratcheting loading domain, the Kröner model is more accurate and a explanation is proposed.

2.1. Introduction

The thermo-elastic solution proposed by Eshelby [155] for an elastic-plastic inclusion surrounded by a linear elastic matrix allowed the elaboration of new mean-field homogenization models. Each ellipsoidal grain is considered as an inclusion embedded in a homogeneous matrix, respecting the equilibrium and compatibility conditions. Based on self-consistency and homogenization, the macroscopic behavior can then be predicted.

Kröner [156] proposed an approach deduced from the thermo-elastic Eshelby interaction law and an average procedure. Applied to a polycrystal, this approach converges to the upper Taylor's bound [157]. Hill [158] proposed a new version of the self-consistent approach allowing the introduction of elastoplastic interactions between the grains and the matrix by using an incremental formulation of the localization rule, resulting in softer predictions than the Kröner ones [157,159]. Further, Berveiller and Zaoui [157] deduced from the Kröner model an explicit interaction law by introducing a corrective accommodation factor, which depends on the remote plastic strain through the secant moduli. This approach has been validated by comparison with full-field finite elements (FE) calculations [160,161], with a maximum difference of 8% in the macroscopic stress levels.

The incremental formulation proposed by Hill in the elastoplastic framework was extended to viscoplasticity by Hutchinson [162]. Later, Molinari et al. [163] introduced a non-incremental self-consistent approach for tackling the large deformation of viscoplastic polycrystals, based on the first-order Taylor expansion. The non-incremental formulation results in softer grain-matrix interactions than the incremental models [164]. Moreover, Molinari et al. [164] proposed the use of either the secant or the tangent moduli as linearizing the macroscopic non-linear viscoplastic behavior. In the ideal plastic behavior, the tangent modulus tends to zero, providing results very close to the Reuss lower bound [165]. They showed that the secant moduli are higher than the tangent ones, therefore stiffer grain-matrix interactions are introduced and higher stress levels are predicted.

Elasticity has been included in various rate-dependent viscoplastic self-consistent models, reviewed by [166]. Elastic-viscoplasticity results in additional complications, which involves different orders of time derivation. In order to overcome these difficulties, numerous homogenization theories were developed.

In particular, Mercier et al. [167] validated a generalized law of the Molinari viscoplastic tangent model, which was proposed to predict the elastic-viscoplastic behavior of heterogeneous materials [164,168]. An additive law including a thermo-elastic term based on Kröner's localization rule and a viscoplastic term based on Molinari's localization rule defines this localization rule. A fourth order tensor defines the tangent viscoplastic moduli

of the matrix. In the initial stage of loading, characterized by low stress but high stress rate, the grain/matrix interaction is assumed thermo-elastic, turning out to be viscoplastic after this transient regime. This model results in predictions of the mechanical behavior of composite materials with large phase contrast in fair agreement with FE computations [169].

Based on translated fields and self-consistent assumptions, Mareau et al. [170] proposed a generalization of the “affine formulation”, initially proposed by Masson et al. [171] to solve the elastic-viscoplastic heterogeneous problem. This scale transition model describes local behavior coupling time-independent and time-dependent behaviors. Moreover, Lahellec and Suquet established an approach able to couple visco-elasticity [172,173] and elastic-viscoplasticity [174,175] from the derivation of an incremental variational principle at the end of each time step. The so-called “second-order procedure” couples elastic and dissipative effects throughout the description of two constitutive potentials. Although these last two mean-field approaches were validated with respect to full-field Fast Fourier Transform (FFT) calculations [176–178], considering composite materials and polycrystals, their numerical implementation is not straightforward, requiring also large computation time.

The aim of this work is then to study the ability of some self-consistent models to predict the overall behavior of face-centered cubic (FCC) polycrystals. In addition, a new scale transition law, called Kröner-Secant, is proposed in this work. This model is based on the additive law proposed by Molinari et al [167,168] and can be implemented very easily. The difference between both methods is the use of the secant moduli instead of the tangent ones, to linearize the macroscopic viscoplastic behavior. As mentioned previously, the use of the tangent moduli in the case of rate-independent plasticity leads to a large underestimation of the macroscopic stress and the secant moduli allow a much more accurate prediction. In addition, we consider an isotropic viscoplastic behavior, defined by scalar moduli instead of tensorial ones applied by Mercier et al. [167].

Elastic-viscoplastic crystalline constitutive laws are proposed for FCC crystals. For the sake of simplicity, isotropic elasticity is considered. Two situations are considered: firstly, the viscoplastic behavior of FCC polycrystals is studied. No hardening law is considered. The overall and local behavior results only from the difference in the grain orientations, resulting in random Schmid factor values. The homogenization models are evaluated considering a broad range of loading conditions: tensile loading at different strain rates, relaxation tests and creep tests. In a second phase, hardening laws are introduced and the models are evaluated under fatigue and ratcheting conditions.

The predictions of the self-consistent models are compared to the results of full-field FE computations carried out on large aggregates, which are considered as reference ones. In

contrast with the self-consistent approaches proposed in this work, the FE computations take into account not only the crystallographic orientations but also the intra-grain fluctuations of the stress and strain fields. Additionally, the full-field FE method accounts for the specific position of each grain in the aggregate and the effect of the neighbors grains on it [160,179,180].

In Section 2.2, the crystalline constitutive laws and the considered self-consistent homogenization procedures are described. Section 2.3 is devoted to the study of the macroscopic response of each model under tensile loading, considering a large range of rate sensitivity and strain rate, relaxation tests and creep tests. Moreover, the local response is evaluated through cumulative distribution curves of the average stress or strain in grains. Section 2.4 presents the response of each model under fatigue and ratcheting loadings. Finally, a general discussion is proposed in Section 2.5.

2.2. Model description

In the case of FCC single crystal, three parameters are required to describe anisotropic elasticity laws [75]. For the sake of simplicity, the anisotropy of elastic behavior of FCC crystals is not considered in this study. The overall Young's modulus, \mathbf{Y} , the Poisson's ratio, ν , of the polycrystal are used and assumed to be the same in the matrix and in each individual grain.

2.2.1. Stress localization rules

In this study, three self-consistent rules easy to implement numerically are evaluated by comparison to the full-field FE calculations in the elastic-viscoplastic framework. Considering spherical grains and under uniaxial loading, these approaches can be summarized by the following equation:

$$\underline{\underline{\dot{\sigma}}} = \underline{\underline{\dot{\Sigma}}} + 2\mu(1 - \beta) \left(\underline{\underline{\dot{E}^{vp}}} - \underline{\underline{\dot{\epsilon}^{vp}}} \right) + 2\mu(1 - \beta) \eta^{-1} \left(\underline{\underline{\Sigma^d}} - \underline{\underline{\sigma^d}} \right) \quad \text{Equation 2.1a}$$

with $\beta = \frac{2(4-5\nu)}{15(1-\nu)}$

$$\textit{tangent modulus} \Rightarrow \eta = \frac{\dot{\Sigma}_{11}}{\dot{E}_{11}^{vp}} \quad \text{Equation 2.1b}$$

$$\textit{secant modulus} \Rightarrow \eta = \frac{\Sigma_{11}}{E_{11}^{vp}} \quad \text{Equation 2.1c}$$

where $\underline{\underline{\dot{\sigma}}}$ and $\underline{\underline{\dot{\epsilon}^{vp}}}$ are the average orientation stress and inelastic strain rate tensors in each grain and $\underline{\underline{\dot{\Sigma}}}$ and $\underline{\underline{\dot{E}^{vp}}}$ are the corresponding polycrystal averages. The deviatoric stress tensors at the crystal and the polycrystal scales are denoted as $\underline{\underline{\sigma^d}}$ and $\underline{\underline{\Sigma^d}}$, respectively. The elastic shear modulus is denoted as μ . Because of homogeneous elasticity, the macroscopic viscoplastic strain rate tensor is equal to the average polycrystalline one.

First, the Kröner localization rule is deduced from Equation 2.1 by choosing $\eta^{-1} = \mathbf{0}$. By doing so, only the thermo-elastic interactions between the grains and the matrix are taking into account.

The second localization rule take into account tangent moduli, based on the work of Mercier and Molinari [167–169]. Instead of the fourth order tenseur to define the tangent viscoplastic moduli of the matrix, an isotropic viscoplastic behavior is considered and scalar tangent moduli are applied. Given that $\eta^{-1} \neq \mathbf{0}$, the overall response depends also on the viscoplastic interactions between grains and matrix. During a tensile loading, the viscoplastic term becomes larger as the viscoplastic strain increases. Therefore, the stress rate that characterizes the initial stage of loading is drastically reduced. In the following, the additive formulation using the tangent modulus to linearize the macroscopic viscoplastic behavior is named “Kröner-tangent”.

Finally, the scale transition proposed in this work, called Kröner-Secant, uses the secant modulus to linearize the macroscopic viscoplastic behavior. As mentioned previously, enhancements in the elastic-viscoplastic framework are expected by using this viscoplastic secant modulus.

2.2.2. Crystal viscoplasticity laws

For a FCC structure, the dense $\{111\}$ planes and the dense $\langle 110 \rangle$ directions allow the definition of twelve easy slip systems. Each shear stress, τ_i , results from the projection of the local stress tensor, $\underline{\underline{\sigma}}$, on a slip system $i = 1, 12$:

$$\tau_i = \underline{\underline{\sigma}} : (\underline{\underline{\mathbf{m}}}^i \otimes \underline{\underline{\mathbf{n}}}^i) \quad \text{Equation 2.2}$$

In Equation 2.2, $\underline{\underline{\mathbf{m}}}^i$ is the unit vector along the slip direction and $\underline{\underline{\mathbf{n}}}^i$ the unit normal vector perpendicular to the slip plane i .

2.2.2.1. Crystal viscoplastic flow law

According to the theory of thermally activated process, viscoplastic glide in slip system i occurs when the effective stress, τ_i^* , acting on the dislocations is positive. The viscoplastic slip rate is expressed in Equation 2.3. In this equation T denotes the temperature, V the activation volume, Q the activation energy, κ_b the Boltzmann constant and A a material parameter proportional to the mobile dislocation density.

$$\dot{\gamma}_i^{vp} = A \cdot \exp\left(-\frac{Q}{\kappa_b T}\right) \cdot \sinh\left(\frac{V\tau_i^*}{\kappa_b T}\right) \quad \text{Equation 2.3}$$

2.2.2.2. Crystal hardening laws

In this chapter, it is firstly evaluate the proposed self-consistent rules under monotonic loading without considering any intragranular hardening. In that case, the effective stress is given by:

$$\tau_i^* = |\tau_i| - \tau_0 \geq 0 \quad \text{Equation 2.4}$$

In a second step, the validity of self-consistent rules to describe cyclic behavior of FCC polycrystals will be evaluated. At the crystal scale, the cyclic behavior will be described through a usual hardening law of the effective stress:

$$\tau_i^* = |\tau_i - x_i| - \tau_{c,i} - \tau_0 \geq 0 \quad \text{Equation 2.5}$$

Where x_i is the kinematic stress (back-stress) for each slip system, described by an Armstrong-Frederick non-linear hardening law [181]:

$$\dot{x}_i = \alpha C \dot{\gamma}_i^p - \alpha x_i |\dot{\gamma}_i^{vp}| \quad \text{Equation 2.6}$$

The evolution law of the critical shear stress ($\tau_{c,i}$) is described by:

$$\dot{\tau}_{c,i} = h_0 \sum_{j=1}^{12} a_{i,j} |\dot{\gamma}_j^{vp}|, \text{ with } \begin{cases} a_{i,j} = q \\ a_{i,i} = 1 \end{cases} \quad \text{Equation 2.7}$$

Where h_0 is the isotropic hardening modulus, and τ_0 is the initial critical shear stress, considered to be the same for all slip systems. These parameters together with the latent hardening coefficient (q) and the kinematics parameters, C and α , are material dependent parameters.

In the following, the same crystal elastic and viscoplastic constitutive laws are used for full-field FE and mean-field self-consistent calculations for the sake of comparisons.

2.2.3. Convergence with respect to numerical modeling

Using the same crystal elastic-viscoplastic rules, mean-field homogenization and full-field FE calculations are performed. In the following, fully random crystal orientation distribution is considered, allowing an overall isotropic behavior of the FCC polycrystal.

2.2.3.1. Mean-field homogenization

The mean-field homogenization calculations are carried out using the SiDoLo software [182]. Since differences in the morphology and the spatial distribution of the grains are not taking into account, the heterogeneities at the grain scale arise from the differences in the crystal orientations only [177,183], whatever the considered self-consistent procedure. For

the self-consistent approaches, homogeneous conditions of stress/strain are applied on each inclusion problem.

Figure 2.1.a shows the overall tensile curve of polycrystals composed of 50, 100, 300 and 500 grains orientations, using the Kröner-Secant approach. The number of grains clearly affects the behavior of the aggregate, with an increase in the overall stress response. This effect tends to saturate as the number of grains increases. The difference in the predicted overall stress computed with 100 and 500 grains is lower than 4%. Similarly, the cumulative distribution curve of the normalized average plastic strain in grains (Figure 2.1.b) does not show any significant difference between these two polycrystals. The distribution amplitudes differ by less than 6% and the standard-deviation (SD) by less than 2%. The same dependence is observed for Kröner and Kröner-Tangent self-consistent approaches. Since the computation time is strongly affected by the number of crystals, a polycrystal made of 100 grains with random orientations is used in the following.

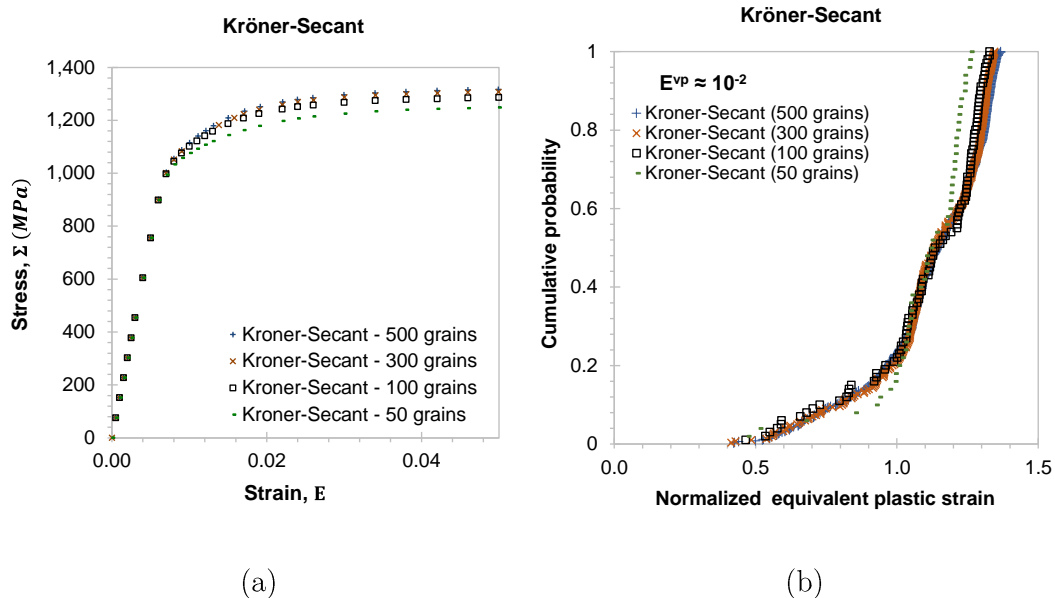


Figure 2.1 (a) Influence of the number of grains on the overall tensile curve (b) and the distribution of average orientation equivalent viscoplastic strain for the Kröner-Secant mean-field approach.

2.2.3.2. Full-field finite elements computations

The full-field finite elements calculations are carried out using the CAST3M software with the adopted crystal constitutive laws implemented in a user material subroutine (UMAT) [184–186]. Taking into consideration the results of Sauzay et al. [187], the polycrystalline volume is defined using cubic grains, built using linear cubic elements (CUB8). These authors used the same crystalline constitutive laws to evaluate the behavior of different kinds of aggregates: very realistic austenitic stainless steel aggregate made from electron backscatter diffraction (EBSD) measurements carried out on different sections of the same polycrystal, polyhedral grains and cubic grains. No significant difference was observed in

the overall stress response of these three aggregates, but the computation time is largely lower using the cubic grains.

Either uniaxial displacement or uniaxial stress is applied to one face of the cubic aggregate. A non-displacement condition is imposed at the opposite face. The four other faces are free. Finally, the displacements required to avoid any rigid body motion are set to zero. Figure 2.2.a presents the overall stress responses for crystalline aggregates as a function of the numbers of grains and FEs/grain. The overall stress response decreases when the number of grains and/or the number of elements per grain increases. An aggregate with 125 grains and 125 FEs/grain allows a good prediction of the overall behavior in a reasonable computation time. The relative numerical error on the computed macroscopic stress is lower than 2%, comparing such aggregate with the one composed by 343 grains and 343 FEs/grain. The cumulative distribution curves of the normalized average plastic strain in grains are barely affected by the use of a larger number of grains or elements per grain (Figure 2.2.b). The amplitudes of the distribution curves differ by less than 4% and the standard-deviations (SD) differ by less than 2%.

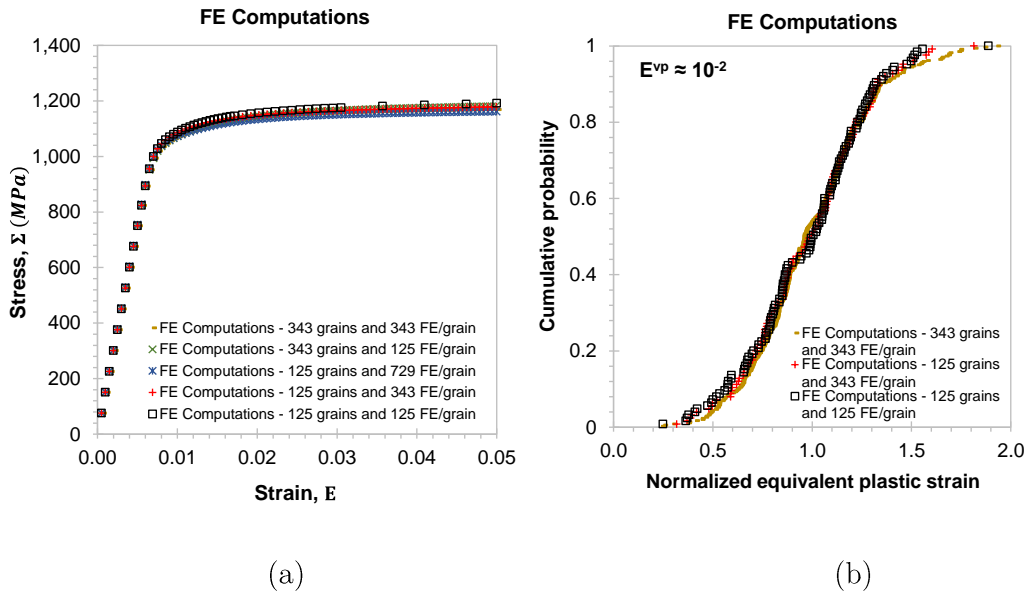


Figure 2.2 (a) Influence of the numerical parameters on the overall tensile curve and (b) the distribution of average grain viscoplastic strain for the FE method.

2.3. Assessment of self-consistent models under tensile loading

In this part, the self-consistent models are evaluated under monotonic loading in the elastic-viscoplastic framework by comparison to full-field FE calculations in the same loading conditions. At this step, the intragranular hardening laws are not considered and the strain rate sensitivity of the mean-field approaches is evaluated in a large elastic-viscoplastic domain. Two specific cases are considered. Firstly, the response of each approach is studied in an elastoplastic domain, in which the viscous effect is negligible

(Section 2.3.2.1). Then, different regimes of viscosity are considered (Section 2.3.2.1). The viscosity effect is stronger for lower values of the activation volume and for higher strain rates.

2.3.1. Material parameters and tensile loading conditions

The elasticity parameters, Υ and ν , and the initial critical shear stress, τ_0 , considered in this first part are given in Table 2.1. The strain-rate sensitivity is controlled by the viscoplasticity parameters, the activation volume, V , the activation energy, Q , and the prefactor A . Different values of the activation volume at the grain scale are used, in order to assess the polycrystalline responses of the self-consistent models, from almost perfect plasticity to high viscosity. The parameters A and Q are held constant, resulting in a constant slip-rate prefactor for all tested conditions. As $A = \rho\nu_D b^2$ [121], it can be deduced that $\rho \sim 10^{13} \text{ m}^{-2}$, which is a value typically measured at low plastic strain. Table 2.1 summarizes the values used for each parameter.

Table 2.1 List of the elasticity and viscoplasticity parameters used in the study

Parameters		Values
Υ	Young's modulus	151000 MPa
ν	Poisson's ratio	0.3
τ_0	Initial critical shear stress	30 MPa
A	Viscoplastic flow law pre-factor	$6.25 \cdot 10^6 \text{ s}^{-1}$
Q	Activation energy	3 eV ($4.8 \cdot 10^{-19} \text{ J}$)
V	Activation volume	$30b^3, 100b^3$ and $300b^3$ (*)

(*) b is the length of the Burgers vector, taken as $b = 2.56 \text{ \AA}$.

The monotonic loading conditions studied are presented in Table 2.2. Tensile loading at different strain rates up to a total strain of 5% are imposed to the modeled polycrystals. The stress relaxation behavior is evaluated at the end of the previous tensile loading at the imposed total strain of 5%. Calculation of the creep behavior is also performed at different stress levels after tensile loading at 100 MPa/s. For all simulated loading conditions, a temperature of 873K is considered.

For the various loading conditions, the overall polycrystal curves describing the evolutions of macroscopic stress and viscoplastic strain as a function of time, computed using the Kröner, Kröner-Tangent and Kröner-Secant models are compared to the results of full-field FE calculations. In addition, the average equivalent viscoplastic strain and stress in each grain are computed and normalized by their respective average value over the whole polycrystal. The corresponding cumulative distribution curves are used to evaluate the ability of each self-consistent homogenization model to reproduce the average orientation per grain heterogeneities observed during viscoplastic deformation.

Table 2.2 Conditions of the simulation tests applied to the mean-field and the full-field homogenization models for the assessment of the prediction of the elastic-viscoplastic behavior

Viscoplasticity	Simulation test	Applied total Strain/Stress	Total strain/stress rate
High viscosity domain	Tensile test	$E = 5\%$	$\dot{E} = (10^{-3}, 10^{-5}, 10^{-7}) s^{-1}$
	Relaxation test	$E = 5\%$	$\dot{E} = 10^{-3} s^{-1} (*)$
	Creep	$\Sigma = (200 - 600) MPa$	$\dot{\Sigma} = 100 MPa.s^{-1} (*)$
Intermediate viscosity domain	Tensile test	$E = 5\%$	$\dot{E} = (10^{-3}, 10^{-5}, 10^{-7}) s^{-1}$
	Relaxation test	$E = 5\%$	$\dot{E} = 10^{-3} s^{-1} (*)$
	Creep	$\Sigma = (100 - 250) MPa$	$\dot{\Sigma} = 100 MPa.s^{-1} (*)$
Low viscosity domain	Tensile test	$E = 5\%$	$\dot{E} = (10^{-3}, 10^{-5}, 10^{-7}) s^{-1}$
	Relaxation test	$E = 5\%$	$\dot{E} = 10^{-3} s^{-1} (*)$
	Creep	$\Sigma = (80 - 120) MPa$	$\dot{\Sigma} = 100 MPa.s^{-1} (*)$

(*) initial loading ramp

2.3.2. Tensile tests

2.3.2.1. Rate-insensitive limit

To reach ideal elastic-plastic behavior, the time effect on the mechanical behavior should become negligible. Such rate-insensitivity can be reached by imposing a very high value of activation volume and very low strain rates. The ideal elastoplastic behavior is reached for all models by applying $V = 15000b^3$ and $\dot{E} = 10^{-7} s^{-1}$. Reaching such a state is confirmed by the following: an even higher activation volume ($V = 20000b^3$) at the same strain rate and an even lower strain rate ($\dot{E} = 10^{-9} s^{-1}$) with the same activation volume do not change the results at all.

Figure 2.3 compares the curves predicted by the full-field method with those provided by the different mean-field approaches. The polycrystal tensile stresses are normalized by the critical shear stress, τ_o , resulting in a multiplicative factor (\bar{M}) for each model. Taylor [188] and Reuss [189] predictions in the ideal elastoplastic domain are also calculated and plotted. The predictions of the incremental model proposed by Hill-Hutchinson and the secant-model of Berveiller and Zaoui, taken from [157], are plotted for comparison.

In the rate-insensitive domain, the \bar{M} factor reaches a saturation value of about 2.65 in the case of full-field FE calculations when the plastic strain increases. This value is close to the saturated \bar{M} factor of 2.6 obtained by Belkhabbaz et al. [190,191]. The Kröner model leads to predictions at saturation stage similar to the Taylor upper bound ones, as stated by Berveiller and Zaoui [157]. The Kröner-Tangent approach tends to a behavior similar to the Reuss lower bound. It follows the same trend as the Molinari-tangent model [165]. The Kröner-Secant model results in a \bar{M} of 2.88, differing by less than 9% with the one provided by the FE computation.

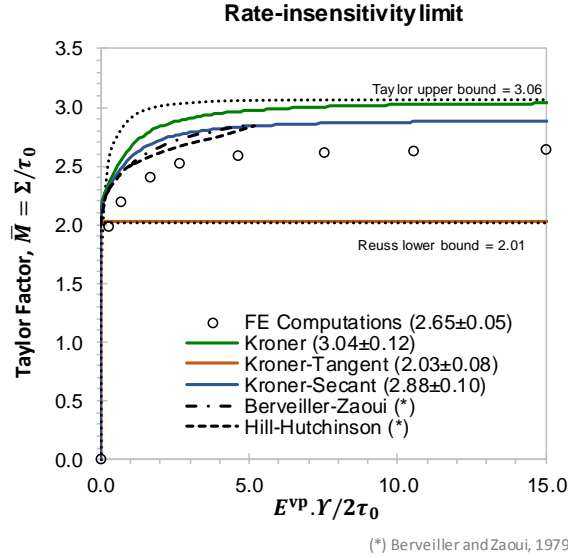


Figure 2.3 Overall tensile responses of the different self-consistent approaches and the FE computations in the case quasi-ideal elastic-plasticity (no hardening and no strain rate effect). The predictions of the Berveiller-Zaoui and the Hill-Hutchinson models are taken from [157].

Many studies have been done in order to provide a direct relation between the mechanical behavior of single-crystals and polycrystals. It has been shown that models assuming a uniform stress tensor (Reuss hypothesis) lead to reasonable predictions of cyclic behavior at low plastic strain amplitudes, where only one slip system is activated [129]. The Taylor hypothesis is better adapted when multiple slip is observed [80]. It is interesting to note that for a computing time as fast as the models proposed by Reuss or Taylor, the Kröner-Secant approach provides a result closer to the one obtained by the full-field FE method.

2.3.2.2. Strain rate effects during tensile loading

Figure 2.4 shows the tensile strain-stress curves calculated at the total strain rate of 10^{-3} s^{-1} for different activation volumes. The relative differences in the overall tensile stresses (at 5% strain for all tested strain rates) predicted by the self-consistent models with the reference FE computations are summarized in Table 2.3.

The Kröner-Secant formulation results in softer predictions than the Kröner ones, differing by less than 9% from the ones provided by the FE computations. Since this model takes into account the elastic-viscoplastic interactions between each grain and the surrounding matrix, its macroscopic response under tensile loading at various strain rates is in a better agreement with the FE than the thermoelastic Kröner model, which overestimates the stress level. Comparing with the Kröner-Tangent formulation, which underestimates largely the stress level comparing with the FE predictions, the replacement of the tangent modulus by the secant one allows a much more accurate evaluation in the framework of the non-linear viscoplasticity, as already noticed in the case of perfect plasticity.

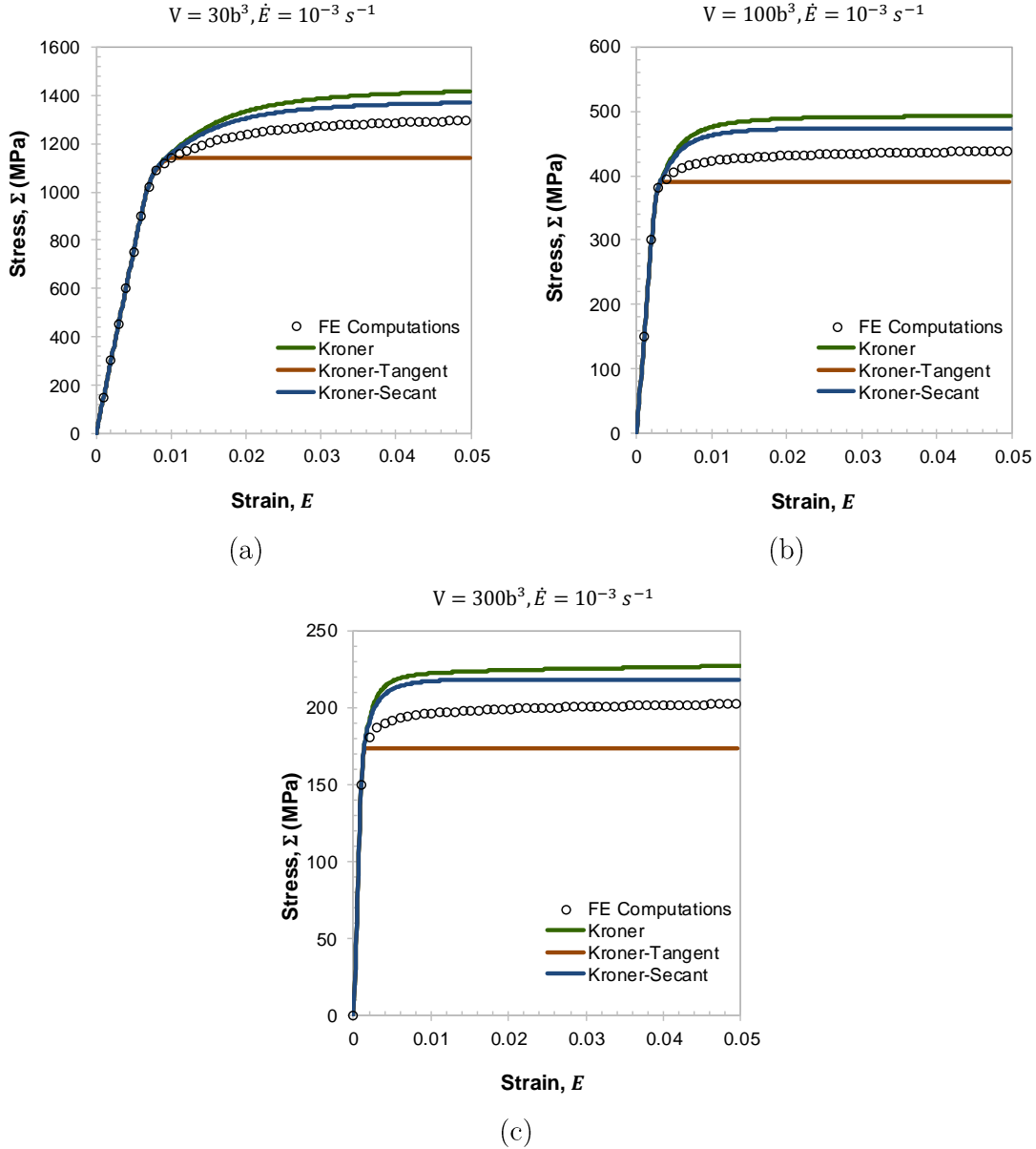


Figure 2.4 Overall tensile responses for strain rate of 10^{-3} s^{-1} , provided by the different self-consistent approaches and the FE computations in case of (a) high ($V = 300b^3$), (b) intermediate ($V = 100b^3$) and (c) low viscosity ($V = 300b^3$).

Table 2.3 Relative differences between the tensile stresses computed by the three self-consistent approaches with respect to the FE calculation results ($E_{tot} = 5\%$)

$\dot{E} \text{ (s}^{-1}\text{)}$	$V = 30b^3$			$V = 100b^3$			$V = 300b^3$		
	10^{-3}	10^{-5}	10^{-7}	10^{-3}	10^{-5}	10^{-7}	10^{-3}	10^{-5}	10^{-7}
Kröner	9%	13%	12%	12%	11%	10%	12%	10%	9%
Kröner-Tangent	-12%	-9%	-9%	-13%	-12%	-12%	-15%	-15%	-15%
Kröner-Secant	6%	9%	8%	8%	7%	6%	8%	6%	5%
FE Comp. (MPa)	1297	949.6	645.0	438.8	346.4	253.2	202.5	170.6	139.8

It is then proposed to compare the contribution of each term of the additive formulation expressed in Equation 2.1 to the macroscopic viscoplastic strain. For the sake of simplicity,

one proposes to consider a homogenous distribution of the viscoplastic strain rate all over the polycrystal, which can be defined as:

$$\underline{\underline{\dot{E}}}^{vp} = \frac{\underline{\underline{\dot{\Sigma}}}}{A} + \eta^{-1} \left(\underline{\underline{\Sigma}}^d \right) \quad \text{Equation 2.8a}$$

with $A = 2\mu(1 - \beta)$ and

$$\eta = \frac{\underline{\underline{\dot{\Sigma}}}_{11}}{\underline{\underline{\dot{E}}}_{11}^{vp}} \text{ (Kr\"oner-Tangent) or } \eta = \frac{\underline{\underline{\Sigma}}_{11}}{\underline{\underline{\dot{E}}}_{11}^{vp}} \text{ (Kr\"oner-Secant)} \quad \text{Equation 2.8b}$$

Figure 2.5 evaluates the balance between the thermo-elastic (first right-hand term in Equation 2.8a) and viscoplastic (second right-hand term in Equation 2.8a) contributions to the overall inelastic strain rate. In Figure 2.5, dashed lines and solid lines correspond to thermo-elastic and viscoplastic contributions, respectively.

For both high and low activation volumes, the thermo-elastic contribution dominates at the beginning of the loading, and the viscoplastic one can practically be neglected, as stated by Mercier et al. [167]. The viscoplastic contribution increases with the applied viscoplastic strain, until the thermo-elastic contribution is reduced to a very low value, and the overall plastic flow is controlled by the viscoplastic term. That scenario is the one assumed by Mercier et al. [167] as using the additive localization rule (Equation 2.1a).

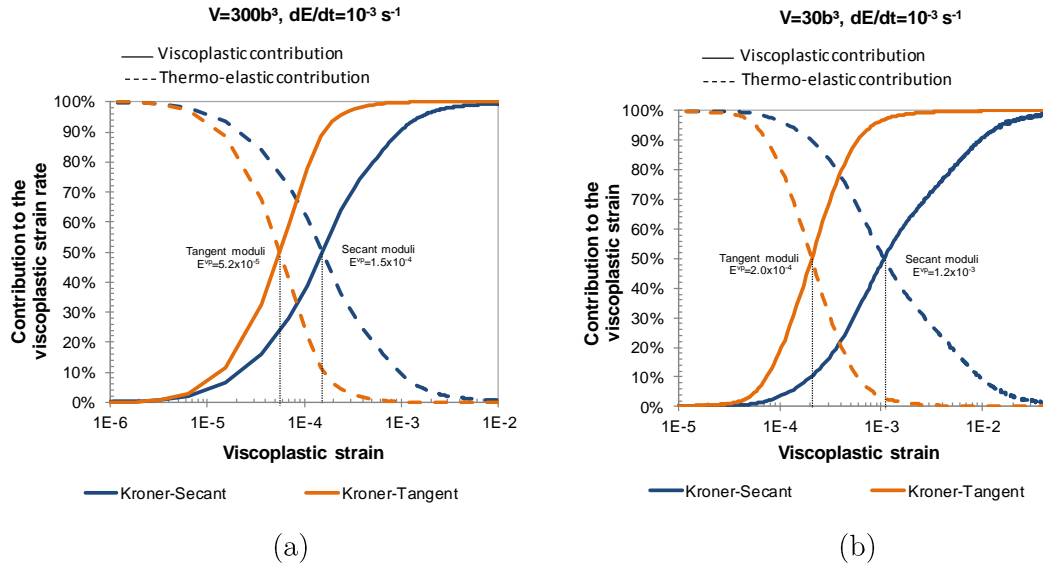


Figure 2.5 Relative contribution of the thermo-elastic (dashed lines) and viscoplastic (solid lines) terms to the inelastic strain, using tangent (Kr\"oner-Tangent model) and secant moduli (Kr\"oner-Secant model). Tensile tests with (a) $V = 300b^3$ and (b) $V = 30b^3$, at strain rate of $10^{-3} s^{-1}$.

The transition in the viscoplastic term of the localization rule occurs at much lower viscoplastic strain if the tangent modulus is used (Kr\"oner-Tangent approach). The transition occurs at a viscoplastic strain about six times higher if the Kr\"oner-Secant approach is used ($V=30b^3$). That explains that the intergranular hardening predicted using

Equation 2.1a and Equation 2.1c (secant moduli) is much higher than using Equation 2.1a and Equation 2.1b (tangent moduli). The transition from the thermo-elastic term to the viscoplastic one appears more rapidly as the viscosity effect is low.

These facts are reflected in the macroscopic tensile curve (Figure 2.4). One can observe a faster saturation of the stress rate when low activation volume ($V=300b^3$) is applied. Moreover, a sharper transition is observed with the tangent formulation. This fast transition results in a very low hardening during the tensile curve, even for the high viscosity domain. The secant formulation results in more evolutive transition and by consequence in a stronger hardening.

As it has been already discussed, more complex methods have also been proposed in the elastic-viscoplastic framework. By applying exponential-type viscoplastic law, in a similar intermediate viscoplasticity domain, Mareau and Berbenni [177] have found a difference lower than 6% using an “affine-formulation” comparing with the full-field FFT predictions. In the viscoplastic framework, Lebensohn et al. [192,193] have found a difference lower than 5% using the “second-order” method in different viscosity regimes, comparing with the FFT method. Although these models allow a fair description of the viscoplastic behavior, their numerical implementation is much less straightforward and time-consuming. The proposed Kröner-Secant model appears as an interesting alternative; it results in a fair description of the overall behavior based on a straightforward implementation and low time-consuming calculations.

2.3.2.1. Average grains distributions under tensile loading

The local response of each model is assessed through the cumulative distribution curves of the average grain tensile stress and equivalent viscoplastic strain in grains. Such curves reflect the heterogeneities within the crystalline aggregates during viscoplastic deformation. In the following, the average equivalent viscoplastic strain $\langle \epsilon_{eq}^{vp} \rangle_{gr}$ and the average stress $\langle \sigma \rangle_{gr}$ are computed for each grain and normalized by their respective average values over the polycrystal, $E_{eq}^{vp} = [\langle \epsilon^{vp} \rangle_{poly}]_{eq}$ and $\Sigma = \langle \sigma \rangle_{poly}$.

2.3.2.1.1. Average grain viscoplastic equivalent strain

Figure 2.6 shows the cumulative distributions of the normalized average equivalent plastic strain at different viscoplastic strains ($E^{vp} \approx 10^{-4}$, $E^{vp} \approx 10^{-3}$ and $E^{vp} \approx 10^{-2}$) under tensile loading at 10^{-3} s^{-1} . Two activation volumes are considered: $V = 30b^3$ and $V = 300b^3$, corresponding to high and low viscosity regimes, respectively.

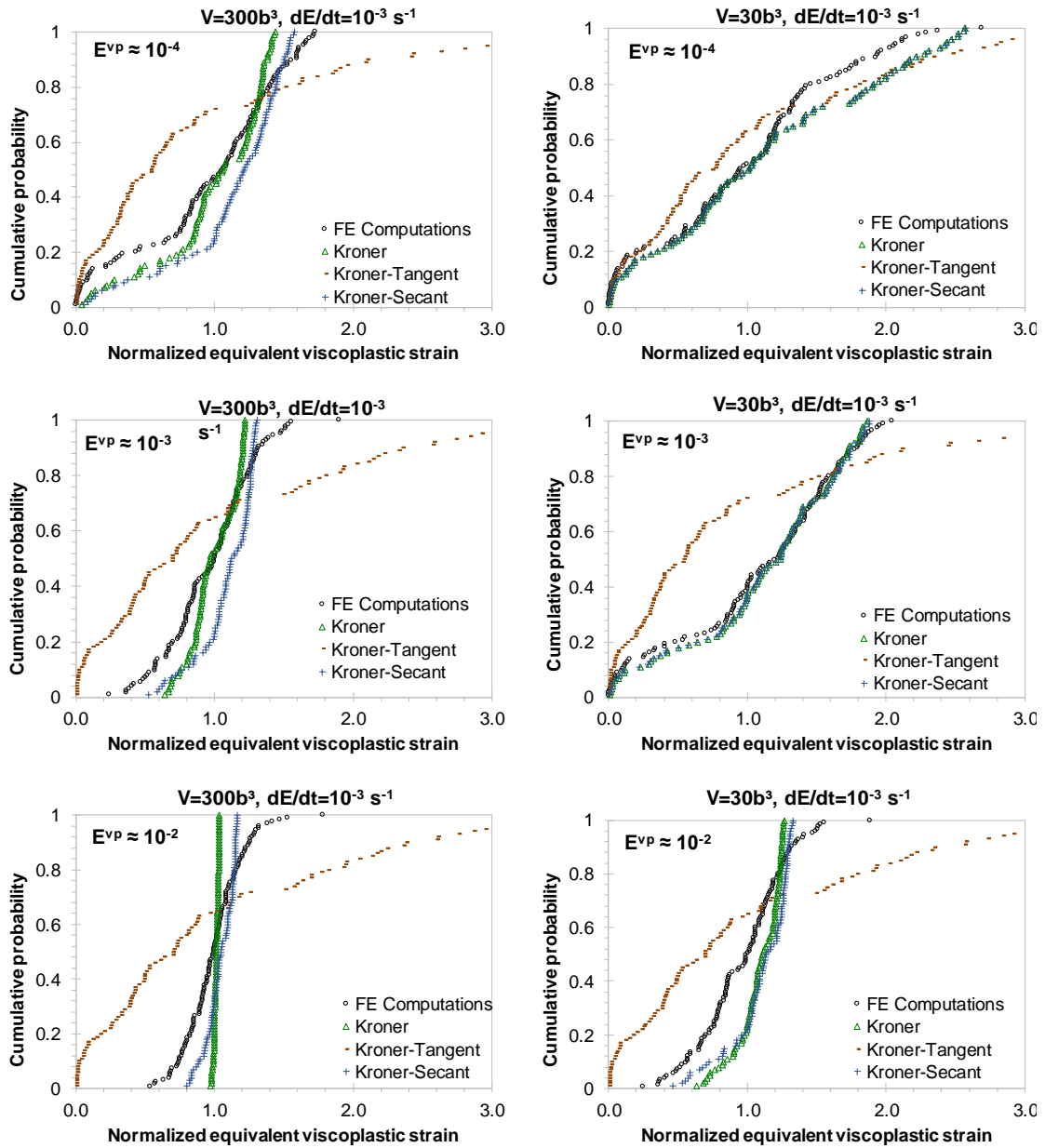


Figure 2.6 Cumulative probability functions of the normalized equivalent plastic strain per grain in the low (left column) and high (right column) viscosity regimes at different remote viscoplastic strain.

Whatever the used homogenization method, the average viscoplastic strain per grain are highly scattered at low viscoplastic strain amplitudes ($E^{vp} \approx 10^{-4}$). Considering for instance the case of FE calculations, some grains are still almost in the elastic domain while others are 2.5 times more viscoplastically deformed than the average value. When the overall viscoplastic strain increases, a more homogeneous distribution of viscoplastic strain in the aggregate is observed.

For both activation volumes, the Kröner-Tangent approach provides a much more scattered distribution curves than the ones provides by the other self-consistent models and the FE method. As it has been shown, the transition between a thermo-elastic and

viscoplastic contributions occurs very quickly with this model. Even at low remote viscoplastic strain, the viscoplastic contribution tends to be very high if the tangent modulus is used (Figure 2.5). This results in a more scattered distribution curve if compared with the other self-consistent model results.

A close similarity of the distribution curves is observed at low remote viscoplastic strain between the full-field calculations and the Kröner and Kröner-secant models. Unlikely what was reported in other studies accounting for the anisotropy of cubic elasticity [179], the effect of the neighbor grains seems to affect only slightly the average grain distribution at low viscoplastic strain. The influence of the neighboring grains become more visible at a viscoplastic strain of 10^{-3} , with the FE computations presenting a more scattered curve than the self-consistent models ones. For $V = 300b^3$, the Kröner approach predicts a quite homogeneous viscoplastic strain distribution at high viscoplastic strain ($E^{vp} \approx 10^{-2}$), which is in accordance with the Taylor hypothesis. The Kröner-Secant rule provides more scattered curves in both viscosity domains ($V = 30b^3$ and $V = 300b^3$) in a bit better agreement with the full-field FE computations ones.

2.3.2.1.2. Average grain stress

Figure 2.7 presents the cumulative distribution curves of the normalized average stress per grain under tensile loading at a strain rate of 10^{-3} s^{-1} . As far as crystal elasticity anisotropy is not accounted for, the incompatibilities between the grains are negligible at low viscoplastic strain, being quasi-elastically accommodated. When the overall viscoplastic strain increases, some scatter is observed. The average grain stress distribution curves provided by the FE calculations are more scattered than the ones computed using the three different self-consistent approaches. Resulting from the interactions with the neighbor grains, some grains are even subjected to compressive stress in low viscosity regime ($V = 300b^3$) at the overall viscoplastic strain of 1%. Similar observations were also reported by Barbe et al. [161].

As expected the Kröner-Tangent model predicts almost stress uniformity, in agreement with the Reuss hypothesis (Figure 2.3). In fact, on the one hand, the Kröner contribution vanishes very early. The Kröner and Kröner-Secant models display almost the same distribution curves. Even if the tested mean-field homogenization models lead to macroscopic predictions close to those computed by the full-field approach, they are not able to reproduce correctly the mean grain strain/stress distribution. This can be related to the fact that mean-field models take into account the scatter induced by the orientation distribution only, and do not account the explicitly incompatibilities between some specific neighboring grains and grains of a given fixed orientation. Using FE calculations and considering the elastic anisotropy of FCC crystals, Sauzay [179] showed that the scatter between grains can be attributed almost equally to the random orientation grains and to

the effect of the neighboring grains. In the elastoplastic domain, Barbe et al. [161] consider as well that the intense plastic deformation observed in some grains is not only related to their orientation, but also to the effect of neighboring grains.

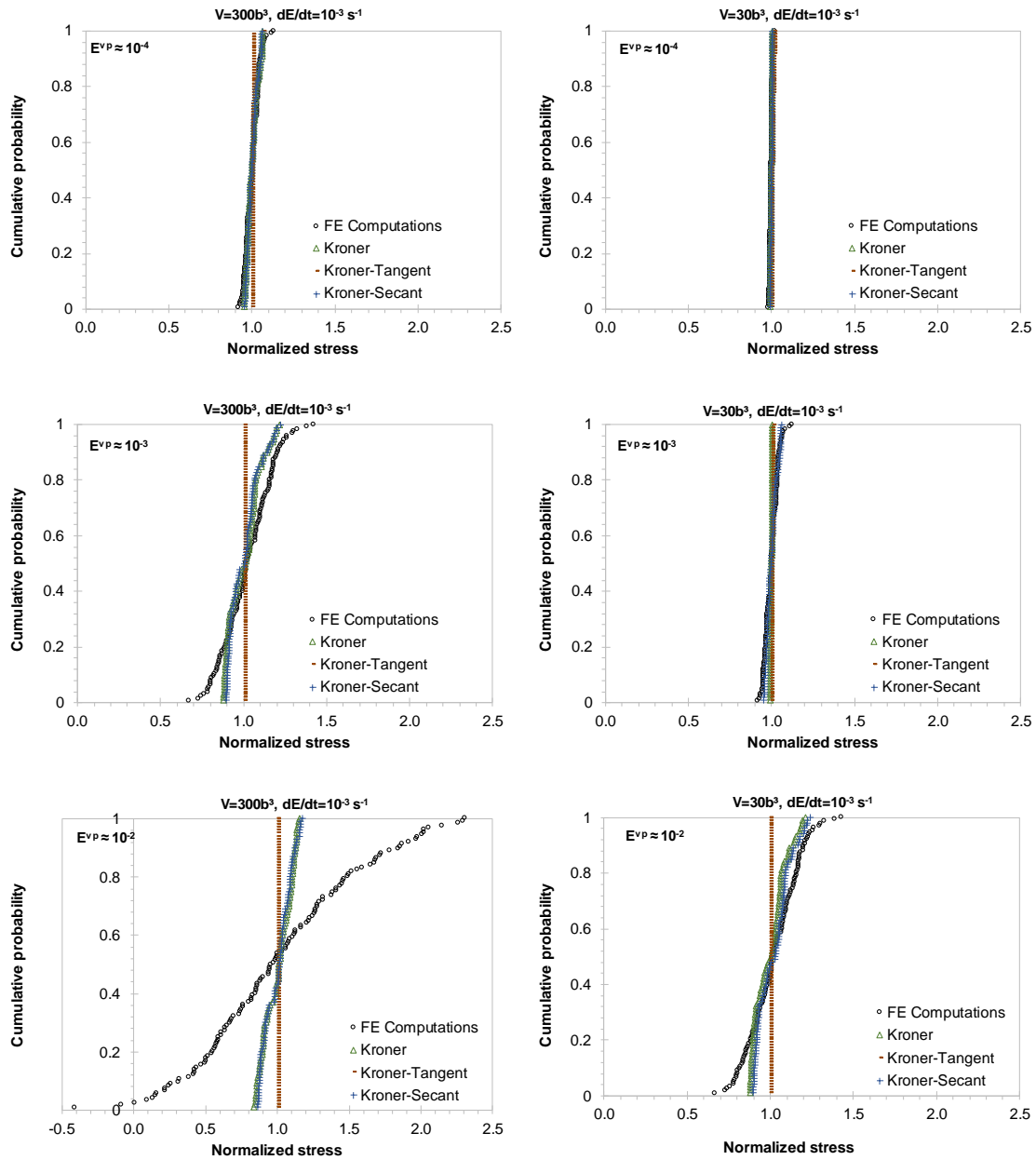


Figure 2.7 Cumulative probability functions of the normalized stress in the low (left column) and high (right column) viscosity regimes at different remote viscoplastic strains.

Some improvements could be expected if second order models were used. Lebensohn et al. [192] applied the “second-order” and the “affine-formulation” approaches in a non-linear viscoplastic FCC polycrystal under tensile loading, using the viscoplastic Norton law, in an intermediate viscosity domain. These models are more able to predict the average orientation stress and strain distributions as compared to FFT calculation results than the self-consistent models considered in this work. Such improvement may be particular useful when the local behavior is of major interest, like as predicting damage.

2.3.3. Relaxation tests

2.3.3.1. Stress relaxation curves

Figure 2.8 shows for various activation volumes the evolution of the macroscopic relaxation stress, Σ_{relax} , with the holding time, t_h , after tensile a loading at a strain rate of $10^{-3} s^{-1}$, up to a total strain $E = 5\%$. The relaxation stress is defined by the difference between the stress at the time t_h , Σ_{th} , and the stress in the beginning of the holding time, Σ_0 : $\Sigma_{relax} = \Sigma_{th} - \Sigma_0$. Compared to the full-field FE calculation results, the Kröner self-consistent model overestimates the stress relaxation, while the Kröner-Tangent approach underestimates it. The most accurate predictions of the overall polycrystal stress relaxation with time are obtained using the Kröner-Secant rule.

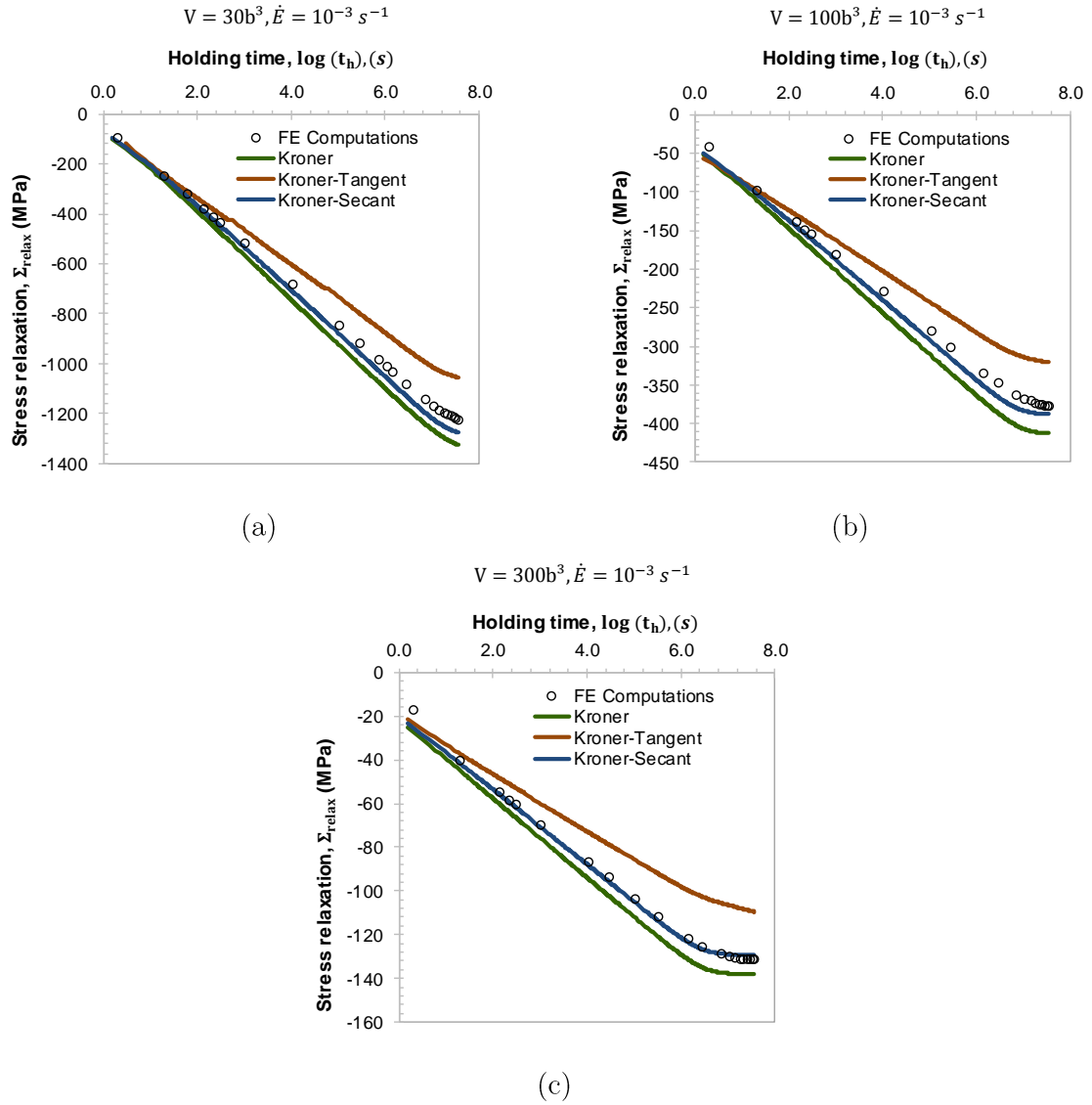


Figure 2.8 Overall response to stress relaxation in function of time provided by the different self-consistent approaches and the FE computations in case of (a) high ($V = 300b^3$), (b) intermediate ($V = 100b^3$) and (c) low viscosity ($V = 30b^3$).

2.3.3.2. Relaxation at the grain scale

The mean stress relaxation in each grain during hold time is shown in Figure 2.9 for the full-field FE calculations and the self-consistent models. These curves have been obtained after tensile loading at 10^{-3} s^{-1} strain rate up to a total strain rate of 5%, in the case of an activation volume $V=100b^3$. The corresponding mean viscoplastic strain in each grain are plotted in Figure 2.10.

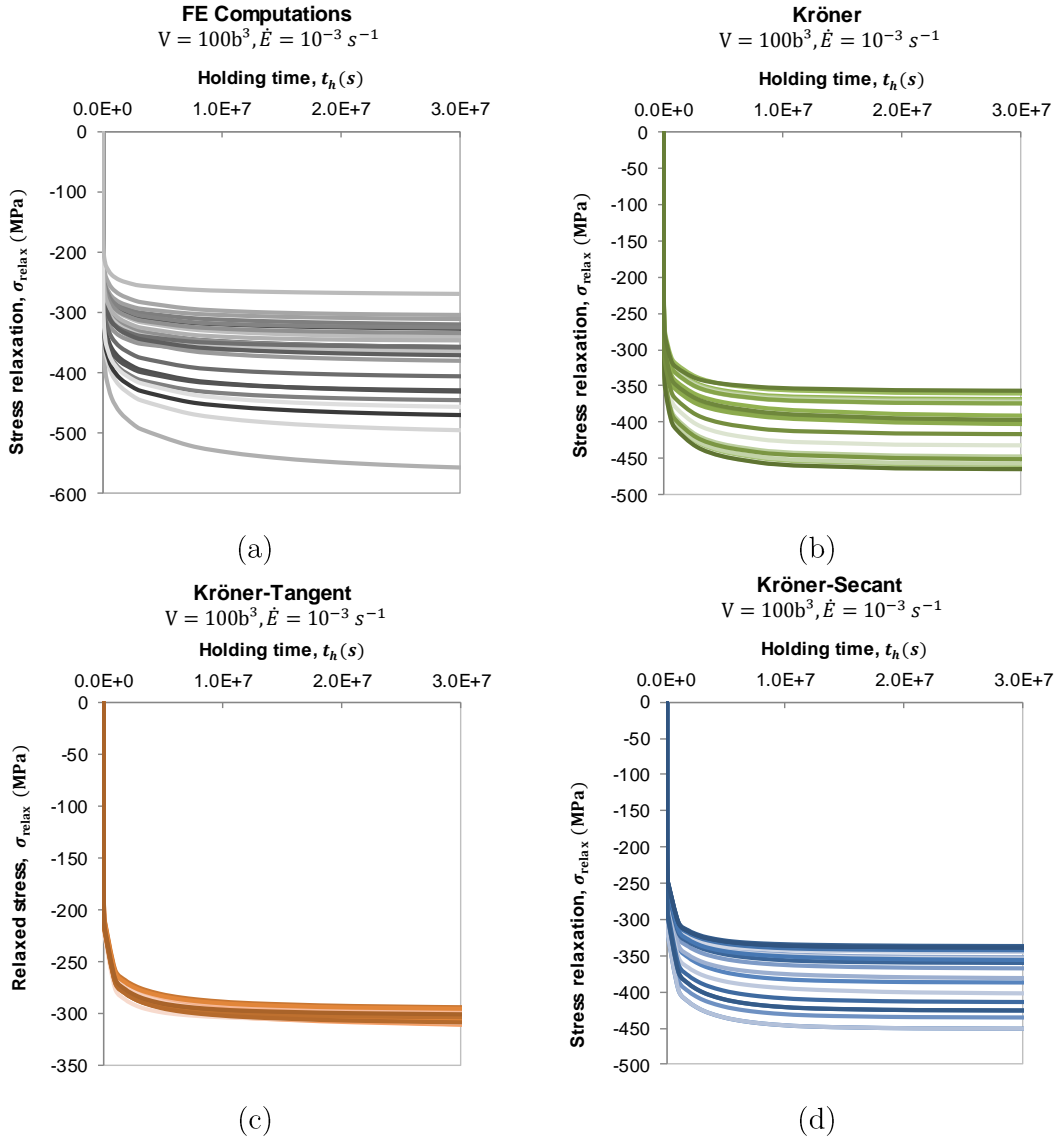


Figure 2.9 Average grain stress relaxation curves in function of the holding time after an initial loading ramp ($V = 100b^3$, $\dot{E} = 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ and $E = 5\%$). a) FE Computations, b) Kröner, c) Kröner-Tangent and d) Kröner-secant self-consistent polycrystals models.

As expected, the grain relaxation curves are much more scattered in the case of FE computations than in the case of self-consistent models. We can note that the Kröner-Tangent model results in a quite uniform stress relaxation (Figure 2.9c), in agreement with Reuss hypothesis. On the other hand, a quite uniform viscoplastic strain can be observed throughout the polycrystal in the case of Kröner model (Figure 2.10a), as expected from

Taylor rule. Even if the proposed Kröner-Secant rules underestimates the scatter of relaxation stress (Figure 2.9d) and viscoplastic strain (Figure 2.10d) between grains, a better agreement is obtained in comparison with the full-field FE calculations.

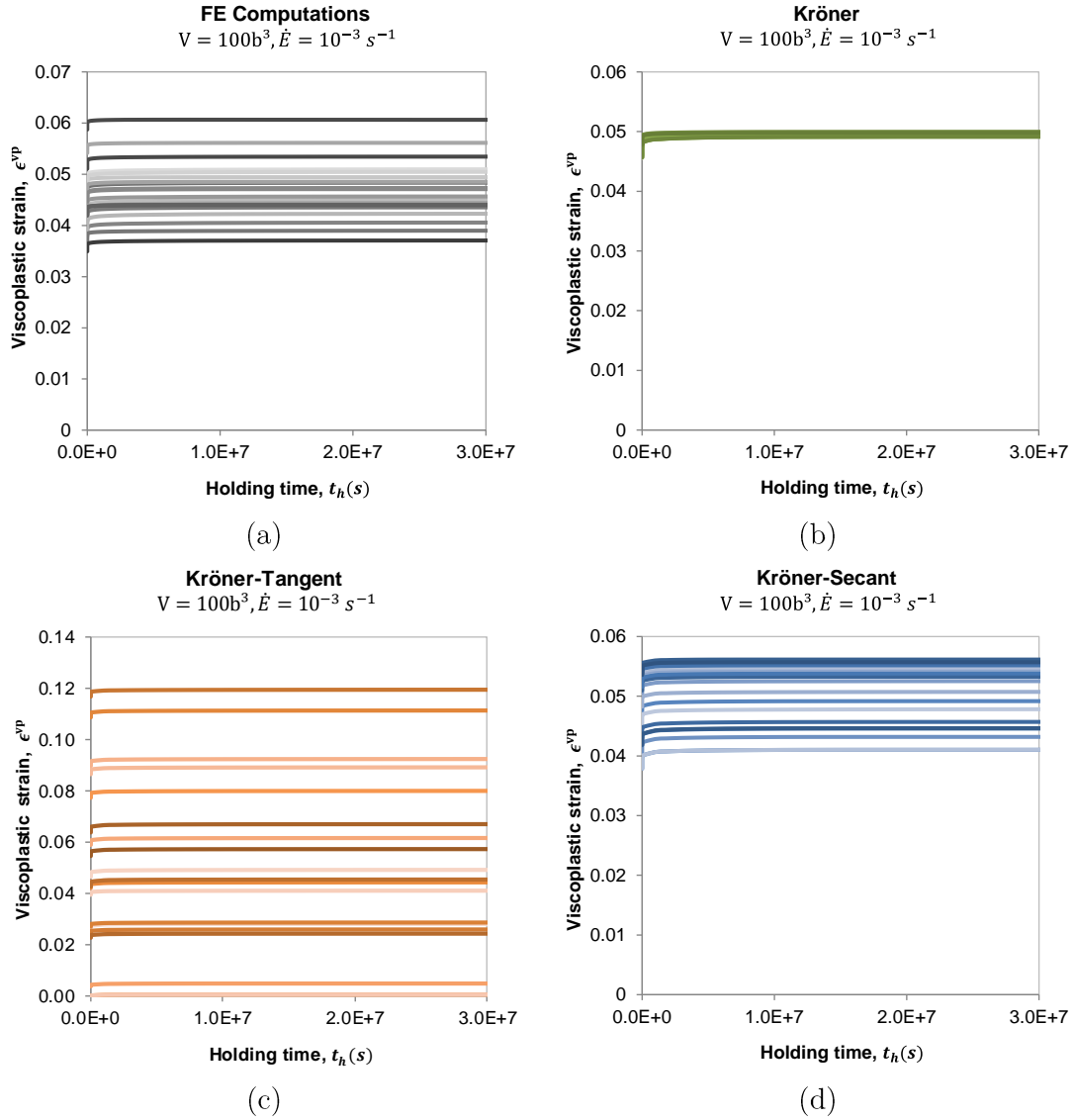


Figure 2.10 Average viscoplastic strain in function of the holding time after a loading ramp ($V = 100b^3$, $\dot{E} = 10^{-3} s^{-1}$ and $E = 5\%$). a) FE Computations, b) Kröner, c) Kröner-Tangent and d) Kröner-secant self-consistent polycrystals models.

2.3.4. Creep tests

The elastic-viscoplastic responses of the self-consistent models during creep are compared with the one provided by the FE calculations. Some creep curves computed are plotted in Figure 2.11, up to holding time of 10^7 s (≈ 2700 h). As expected from the tensile curve predictions, the Kröner-Tangent model overestimates the viscoplastic strain rate while the Kröner and Kröner-Secant ones underestimate it. The analysis of the creep curves shows that an initial non-stationary creep stage, or primary creep, is observed before a steady-state creep strain rate is reached. The steady-state creep strain rate calculated at the end

of of each creep test for various activation volumes as a function of the applied stress are reported in Figure 2.12.

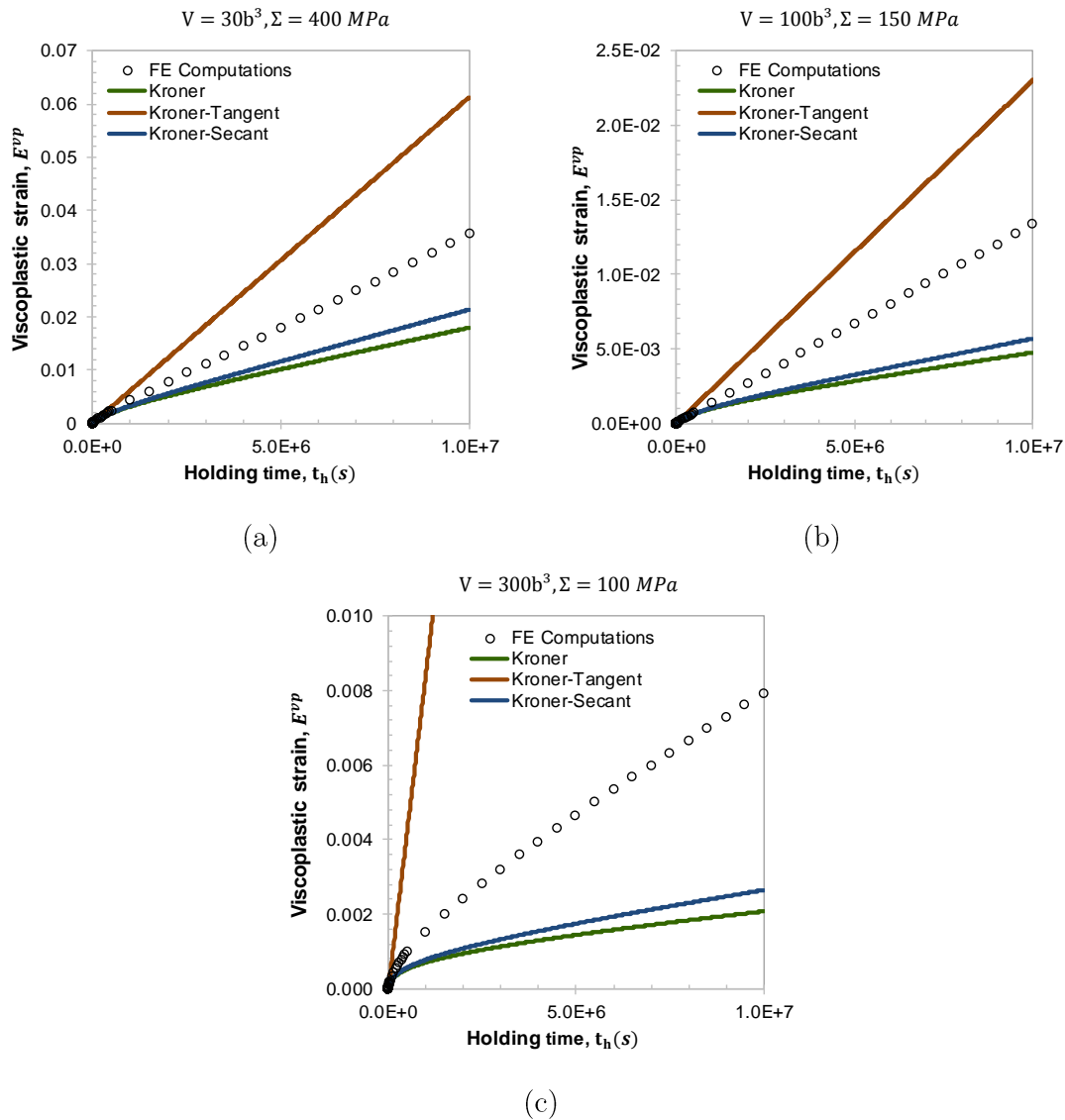


Figure 2.11 Overall response to creep loading for the self-consistent models and the FE method. (a) High viscosity, $V = 30b^3$ and $\Sigma = 400 \text{ MPa}$, (b) intermediate viscosity, $V = 100b^3$ and $\Sigma = 150 \text{ MPa}$ and (c) low viscosity, $V = 300b^3$ and $\Sigma = 100 \text{ MPa}$.

The Kröner-Secant predictions are in slight better agreement with the FE ones, but the predicted steady-state creep strain rates are lower than the FE results. The difference between the curves computed by the FE method and the Kröner-Secant approach is higher in the case of low viscosity. A slight stress variation in the lower viscosity regime results in a more significant variation in the viscoplastic strain rate at the end of tensile loading. The slight overestimation of the grain-matrix interaction using the Kröner-Secant in comparison to FE calculation have then a strong impact on the viscoplastic creep strain rate.

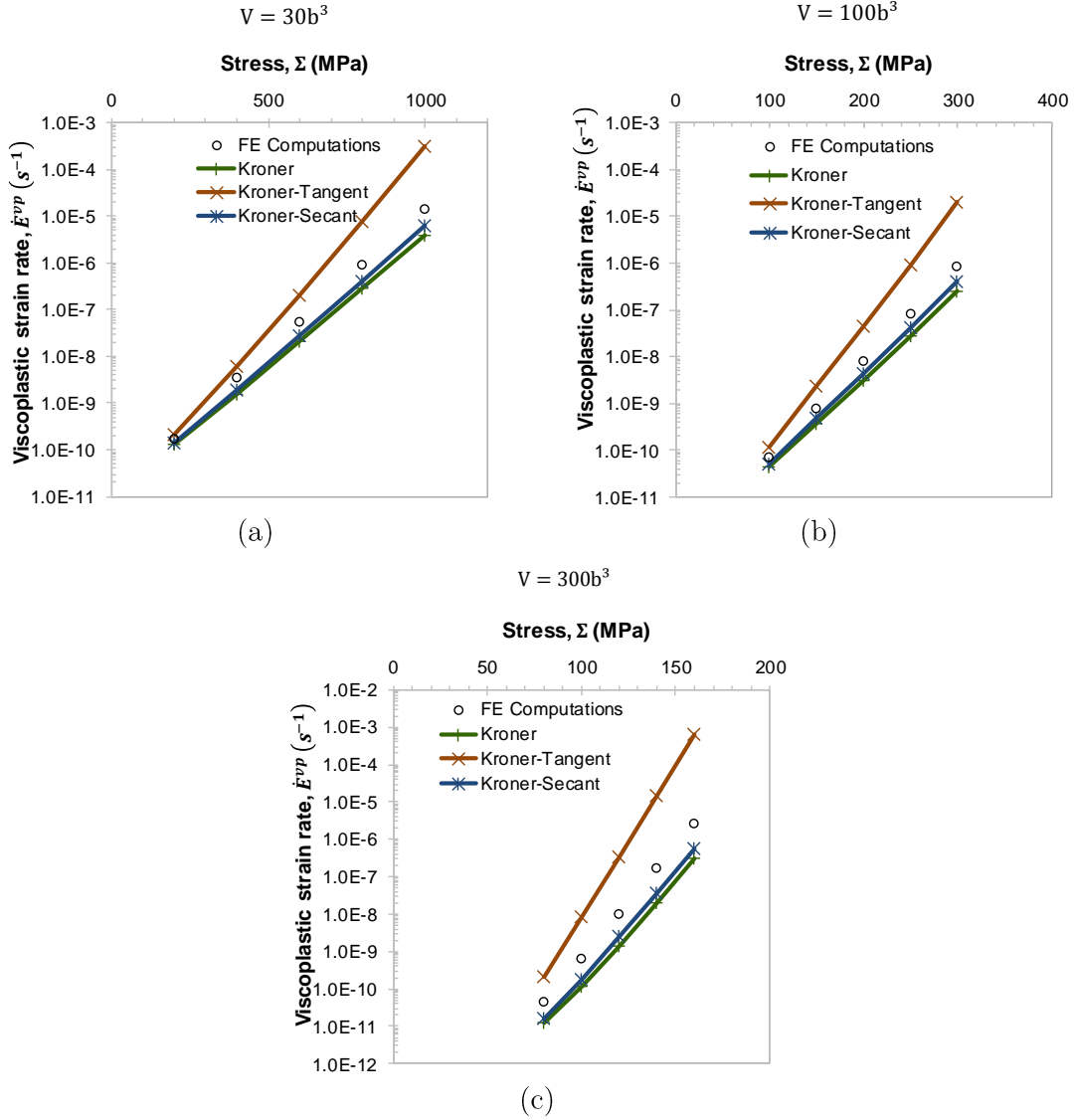


Figure 2.12 Steady-state creep strain rate calculated with the self-consistent models and by the FE method as a function of the applied stress. (a) High viscosity, $V = 30b^3$, (b) intermediate viscosity, $V = 100b^3$ and (c) low viscosity, $V = 300b^3$.

2.4. Assessment of self-consistent models under cyclic loading

In this second step, hardening laws (Equation 2.5, Equation 2.6 and Equation 2.7) at the grain scale are introduced in order to compare the overall response of each self-consistent model with the FE computations under cyclic loading. Since the Kröner-Tangent model significantly underestimates the stress under tensile loading, only the results of the Kröner and Kröner-Secant approaches will be evaluated hereafter.

2.4.1. Material parameters and cyclic loading conditions

Even if the objective of the calculations presented in this part is not to depict experimental results, the viscoplastic parameters are chosen from values determined for 316L(N) stainless steels at room temperature ($V = 100 - 200b^3$ and $Q = 1.5 - 2.0 eV$) [18]. Table 2.4 summarizes the elastic and viscoplastic parameters used in the following.

Table 2.4 List of elastic and viscoplastic parameters

Elastic parameters		Values
\mathbf{Y}	Young's modulus	202000 MPa
ν	Poisson's ratio	0.3
Viscoplastic parameters and constants		Values
κ_b	Boltzmann constant	1.38×10^{-23} J.K ⁻¹
\mathbf{A}	Viscosity law pre-factor	$6.25 \cdot 10^6$ s ⁻¹
\mathbf{Q}	Activation energy	1.5 eV
\mathbf{V}	Activation volume	150b ³

The kinematic hardening parameters at grain scale have been determined by Sauzay et al. [187] for the 316L stainless steel using cyclic stress-strain curves (CSSC) of single crystals oriented for simple and multiple slip. In this work, the kinematic parameters identified for single crystals oriented for multiple slip, are used just to mimic a strong cyclic hardening.

The critical shear stress, τ_0 , and the hardening modulus, H_0 , are considered to be the same for all slip systems. According to experimental observations [20,107], a very low value is used for the isotropic hardening coefficient ($H_0 = 1$ MPa), assuming that the saturated isotropic stress at grain scale does not vary significantly with the plastic strain range [20,107]. A latent hardening coefficient, $\mathbf{a}_{i,j} = \mathbf{q} = 1.4$ ($i \neq j$), is chosen from literature [46], taking into account the stronger latent hardening with respect to self-hardening ($\mathbf{a}_{i,i} = 1$). Table 2.5 summarizes the hardening parameters used in this work.

Table 2.5 Isotropic and kinematic hardening parameters

Isotropic hardening parameters		Values
τ_0	Initial critical shear stress	50 MPa
H_0	Isotropic hardening modulus	1 MPa
\mathbf{q}	Latent hardening coefficient	1.4
Kinematic hardening parameters		Values
α	Kinematic hardening coefficients	38
\mathbf{C}		26600 MPa

In a first step, the ability of the Kröner and Kröner-Secant models to describe the Bauschinger effect is evaluated, by comparison with the results of FE calculations, under strain-controlled forward and backward loading. Then, symmetrical strain-controlled cyclic loadings are investigated from $E = \pm 0.15\%$ up to $E = \pm 1.3\%$. The stress-strain cycle reaches stabilization. The stress amplitude response of the models at the stabilized cycle for different strain amplitudes is analyzed. Finally, the ability of the self-consistent models to predict ratcheting is assessed through stress-controlled cyclic loading at non-zero mean-stress. Table 2.6 summarizes all tested conditions.

Table 2.6 Simulation tests conditions under cyclic loading

Test	Strain/Stress applied
Bauschinger effect	$E = 0.5 \pm 0.5\%$
Symmetric cyclic deformation (zero mean-strain) – strain control	$E = 0.15 - 1.3\%$
Ratcheting (non-zero mean-stress) – stress control	$\Sigma = 50 \pm 250 \text{ MPa}$
	$\Sigma = 50 \pm 270 \text{ MPa}$
	$\Sigma = 50 \pm 290 \text{ MPa}$
	$\Sigma = 70 \pm 250 \text{ MPa}$
	$\Sigma = 30 \pm 290 \text{ MPa}$
	$\Sigma = 125 \pm 275 \text{ MPa}$
Cyclic tests: strain rate $\dot{E}=10^{-3} \text{ s}^{-1}$ or stress rate $\dot{\Sigma}=50 \text{ MPa.s}^{-1}$	

2.4.2. Bauschinger effect

Figure 2.13 shows the first and a quarter of cycle for a strain-controlled tension-compression test. Both Kröner and Kröner-Secant calculations result in curves close to the one computed by the FE method. As expected, after tensile loading, the Kröner-Secant formulation results in softer prediction than the Kröner one, differing by less than 2.5% from the FE computations. After backward loading in compression, the Kröner-Secant approach leads to a compressive stress slightly higher in absolute value. Comparing to the FE computations, the absolute difference is about of 9.5%.

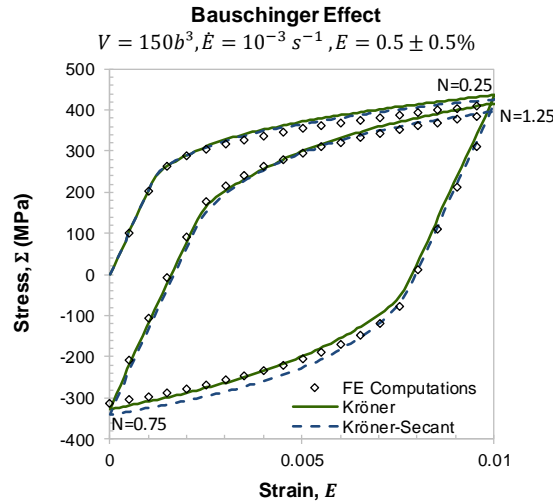


Figure 2.13 First fatigue cycle, at a non-zero mean-strain ($E = 0.5 \pm 0.5\%$), for the self-consistent models and the FE method.

Table 2.7 presents the stress partition between isotropic (R) and kinematic stresses (X), following Cottrell's method [111] applying an offset of $E^{vp} = 10^{-4}$ on the definition of the yield strength (Σ_y). The partition is presented for $N=0.75$, at the end of the backward loading, and for $N=1.25$, at the end of the second forward loading,

Table 2.7 Effective and kinematic stresses for the FE computations and the self-consistent models. An offset of $E^{vp} = 10^{-4}$ is applied on the definition of the yield strength, Σ_y

N=0.75 (end of the backward loading)					
	Σ_y^{+0}	Σ_{max}^{+0}	Σ_y^{-0}	$R^{-0} = \frac{ \Sigma_{max}^{+0} - \Sigma_y^{-0} }{2}$	$X^{-0} = \Sigma_y^{-0} + R^{-0}$
FE Aggregate	254.8	414.8	-83.6	249.2	165.6
Kröner	254.5	436.1	-62.1	249.1	187.0
Kröner-Secant	254.5	424.6	-86.9	255.8	168.9
N=1.25 (end of the second forward loading)					
	Σ_{min}^{-0}	Σ_y^{+1}	Σ_{max}^{+1}	$R^{+1} = \frac{ \Sigma_{min}^{-0} - \Sigma_y^{+1} }{2}$	$X^{+1} = \Sigma_y^{+1} + R^{+1}$
FE Aggregate	-312.6	191.2	398.8	251.9	-60.7
Kröner	-328.0	174.0	422.5	251.0	-77.0
Kröner-Secant	-340.7	160.7	397.0	250.7	-90.5
Values in MPa					

Comparing firstly only the forward (index +0) and backward (index -0) yield strength at N=0.75 cycle, one can notice that both models are able to predict the Bauschinger effect. Quantitatively, the Kröner-Secant model has a yield strength in compression (Σ_y^{-0}) closer to the FE one. However, this model slightly overestimates the isotropic stress (R^{-0}) comparing to the FE computations.

As is has been discussed in many works [153,157,187,194], the Kröner model overestimates the kinematic stress. In fact, following the Kröner approach, the thermo-elastic interactions between the crystals and the matrix induces an overestimation of the internal stresses at the grain scale. Under cyclic loading, this higher kinematic stress tends to increase the yield strength under backward loading (Σ_y^{-0}). The Bauschinger effect during the unloading is slighter better predicted by the Kröner-Secant model due to a more accurate description of the internal stresses during the first quarter of cycle. Since the Kröner-Secant allows elastic-viscoplastic interactions between the grain and the matrix, the incompatibilities between the grains are reduced, resulting in a kinematic stress X^{-0} closer to the one calculated by the FE method.

However, the Kröner-Secant model presents a higher hardening rate at the beginning of the viscoplastic deformation under backward loading than FE one, as can be seen in Figure 2.13. By predicting lower internal stresses at the end forward loading, the Kröner-Secant approach presents higher viscoplastic strain rate in the beginning of reverse viscoplastic deformation. As a consequence, the Kröner-Secant provides a higher absolute stress value of of Σ_{min}^{-0} , at the end of the backward loading (zero strain) (Table 2.7).

Considering now the second forward loading, N=1.25, one can observe that both self-consistent models provides almost the same value of isotropic stress (R^{+1}) as the FE one.

However, the absolute value of the kinematic stress (X^{+1}) is overestimated by both self-consistent models. Moreover, the Kröner-Secant model results in lower yield strength in comparison to the Kröner one, resulting in a higher absolute value of the kinematic stress after the backward loading.

2.4.3. Cyclic stress-strain-curves and hysteresis loops

The cyclic stress-strain curves (CSSC) are plotted using the obtained stress amplitude at different viscoplastic strain amplitudes after the stress-strain loop stabilization. Figure 2.14 compares the stress-strain hysteresis loops for two different strain amplitudes and the CSSCs calculated by the mean-field approaches with the ones provided by FE computations.

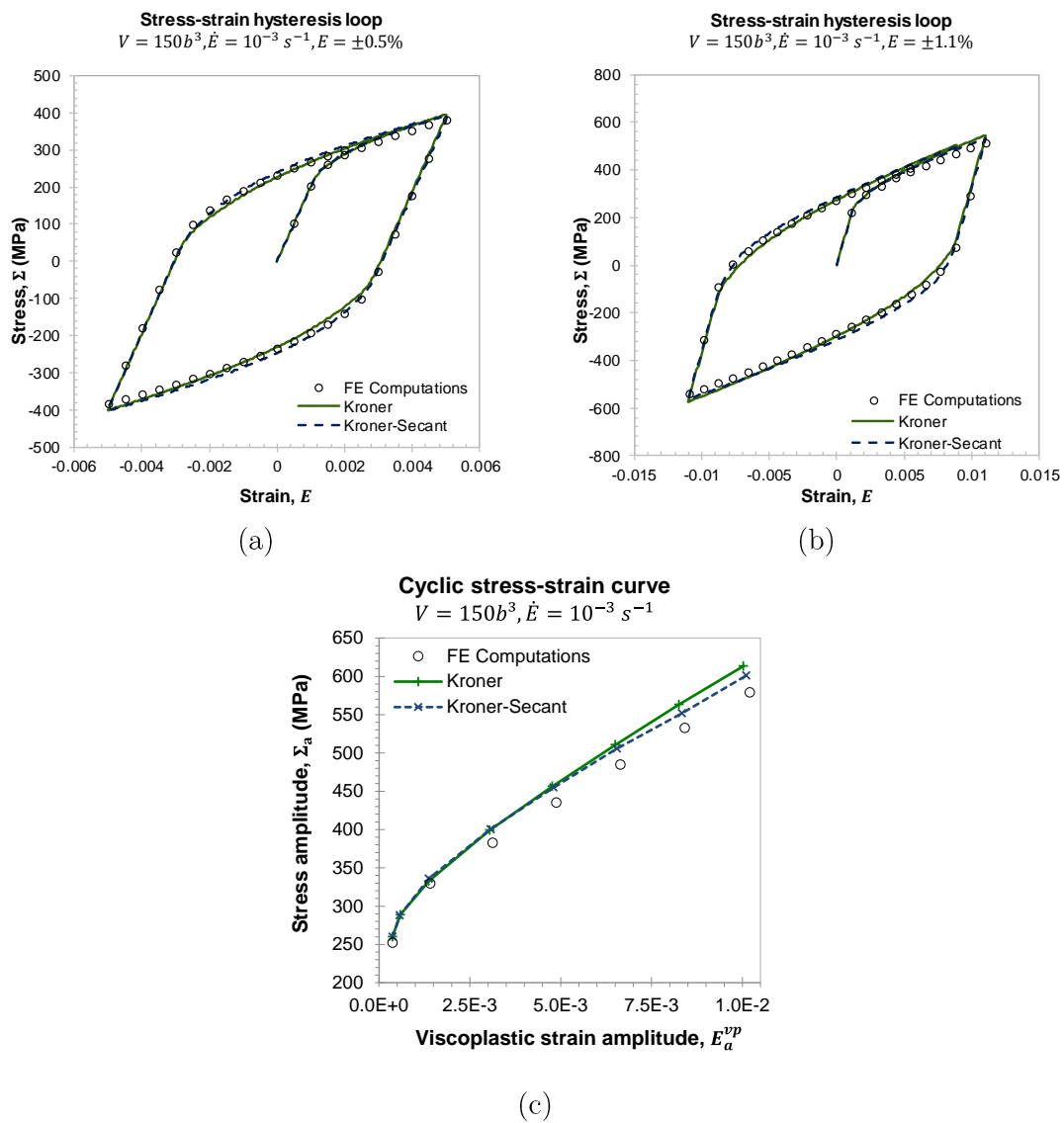


Figure 2.14 Cyclic stress-strain hysteresis loops, (a) $E = \pm 0.5\%$ and (b) $E = \pm 1.3\%$, and (c) CSSC for the self-consistent models and the FE method.

At low viscoplastic strain amplitudes ($E_a^{vp} < 2.10^{-3}$), all the formulations behave very similarly. At this range of viscoplastic strain, only a small fraction of the grains composing the polycrystal is viscoplastically deformed and the incompatibilities between the grains are insignificant. When the viscoplastic strain increases, the Kröner formulation results in higher stress amplitude compared with the Kröner-Secant one. This difference becomes more relevant for $E_a^{vp} > 5.10^{-3}$. However, the difference between the models remains very low. Compared with the FE predictions, the maximum difference observed at $E_a^{vp} = 10^{-2}$ is about of 4% with Kröner-Secant model and 6% with Kröner one.

Both self-consistent models predict fairly well the stress peaks and the shapes of the stabilized stress-strain loop, at low (Figure 2.14a) and high (Figure 2.14b) strain amplitudes. However, some differences, notably in the yield strength and in the hardening rate, are observed between the self-consistent predictions. As discussed in Section 2.4.2, one can observe that the yield strength is in general better described by the Kröner-Secant model. However, this model presents higher hardening rate at compressive deformation, with a more concave curve than the one predicted by the Kröner model.

2.4.4. Ratcheting

The ability of self-consistent models to describe ratcheting behavior of FCC polycrystals is checked through comparisons to full-field FE calculation results in the case of cyclic loading at imposed stress rate and non-symmetric stresses. In the following, the resulting ratcheting strain, E_r , is defined at the end of each cycle by:

$$E_r = \frac{E_{max}^{vp} + E_{min}^{vp}}{2} \tag{Equation 2.9}$$

where E_{max}^{vp} is the maximum axial viscoplastic strain at each cycle, and E_{min}^{vp} is the minimum one. The applied loading conditions (mean stress, maximum stress) are based on experimental tests carried out on 316L(N) SS at room temperature (cf. Chapter 3).

Figure 2.15 displays the evolution of the ratcheting strain for a mean stress of 50 MPa at different stress amplitudes and Figure 2.16 shows the evolution of the ratcheting strain for a maximum stress, Σ_{max} , of 320 MPa at different mean stresses, Σ_m .

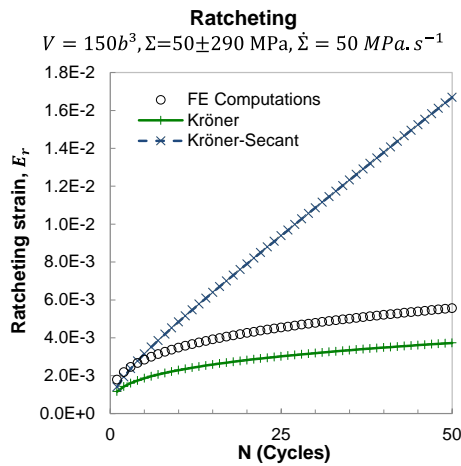
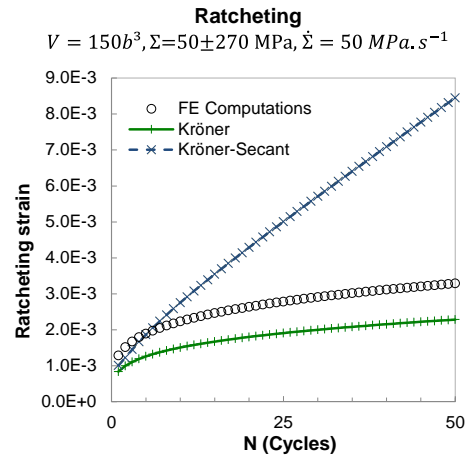
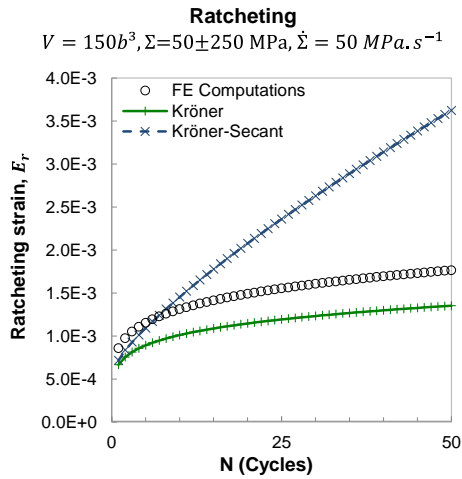


Figure 2.15 Ratcheting strain evolutions for a mean stress of 50 MPa predicted by the two self-consistent models and the FE method. (a) $\Sigma_{max} = 300 \text{ MPa}$, (b) $\Sigma_{max} = 320 \text{ MPa}$ and (c) $\Sigma_{max} = 340 \text{ MPa}$.

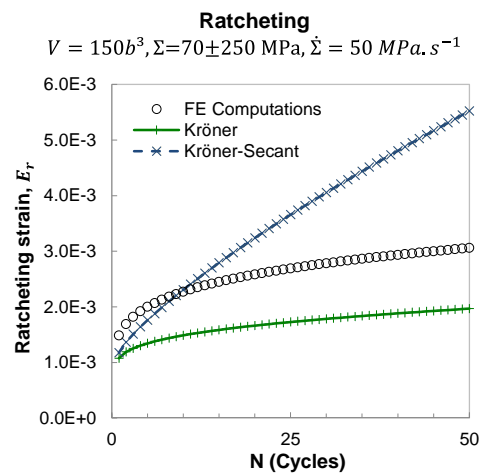
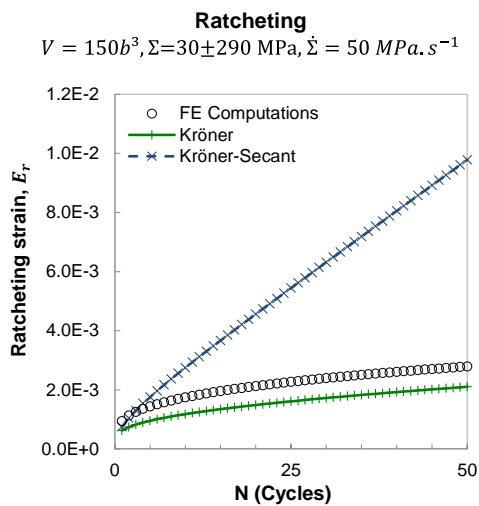


Figure 2.16 Ratcheting strain evolutions for a maximum stress of 320 MPa predicted by the two consistent models and the FE method. (a) $\Sigma_m = 30 \text{ MPa}$ and (b) $\Sigma_m = 70 \text{ MPa}$

As expected, both self-consistent models slightly underestimate the ratcheting strain at the first cycle, since they overestimate the stress level during a tensile loading. Since the Kröner model results in stiffer interactions grain/matrix, the resulting viscoplastic strain after the first tensile loading is smaller than the one provided by Kröner-Secant model (Figure 2.15 and Figure 2.16).

On the one hand, the Kröner model results in a ratcheting strain lower than the one predicted by FE computations, for all applied loading in the considered domain. On the other hand, the Kröner-Secant model greatly overestimates the ratcheting strain after few cycles. The discrepancy with the FE computations increases with the number of cycles. (Figure 2.15 and Figure 2.16).

The viscoplastic strain amplitude (E_a^{vp}) and the ratcheting strain rate, dE_r/dN , of both self-consistent models and the FE computations are displayed in Figure 2.17 as a function of the number of cycles. Both self-consistent models overestimate the E_a^{vp} value for the first cycle. The Kröner model slight overestimates E_a^{vp} , while the Kröner-Secant approach and the FE computations present very similar E_a^{vp} at the saturation state (Figure 2.17a). On the other hand, the Kröner models slight underestimate the ratcheting strain rate evolution, while the Kröner-Secant model largely overestimate it (Figure 2.17b).

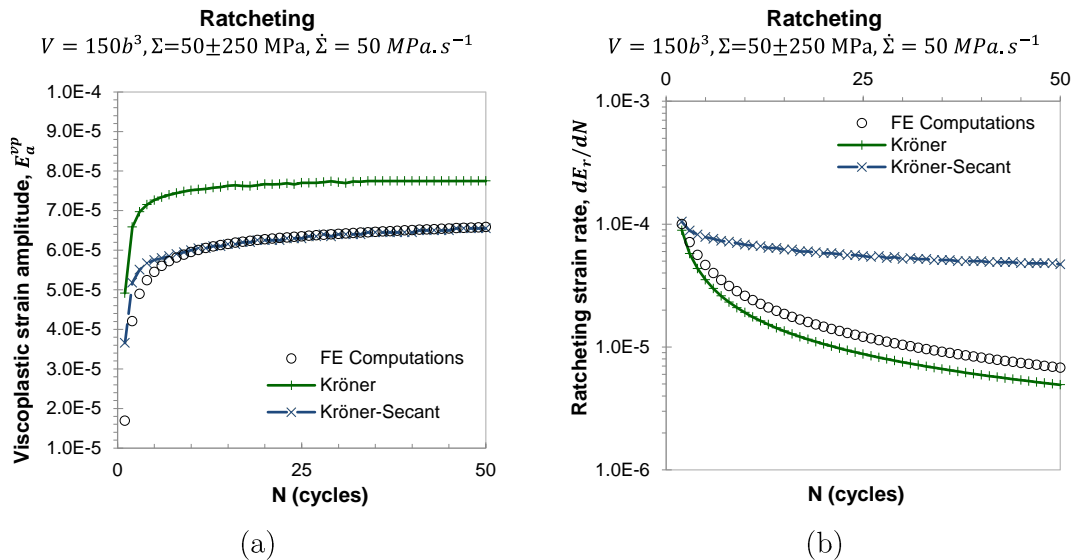


Figure 2.17 (a) Viscoplastic strain amplitude evolution and (b) ratcheting strain rate evolution predicted by the self-consistent models and the FE method, with $\Sigma = 50 \pm 250$ MPa.

It is important to note that the accuracy of the prediction of the ratcheting behavior depends on the representation of the stress-strain hysteresis loop. The correct description of both yield strength and stress hardening is required. The Kröner-Secant model results in a more opened stress-strain loop, as it can be seen in Figure 2.13, leading to a higher ratcheting strain rate. This fact seems to be related to the higher hardening rate observed for the Kröner-Secant rule observed at the beginning of plastic deformation during

backward loading, even if this approach presents a better description of the yield strength. By increasing the mean stress and imposing lower values of minimum stress, the difference between the ratcheting strain curves computed by the Kröner-Secant approach and the FE method considerably decreases (Figure 2.18). Work is in progress to confirm this trend and define a loading domain for which the Kröner-Secant model would be in agreement with the FE computations.

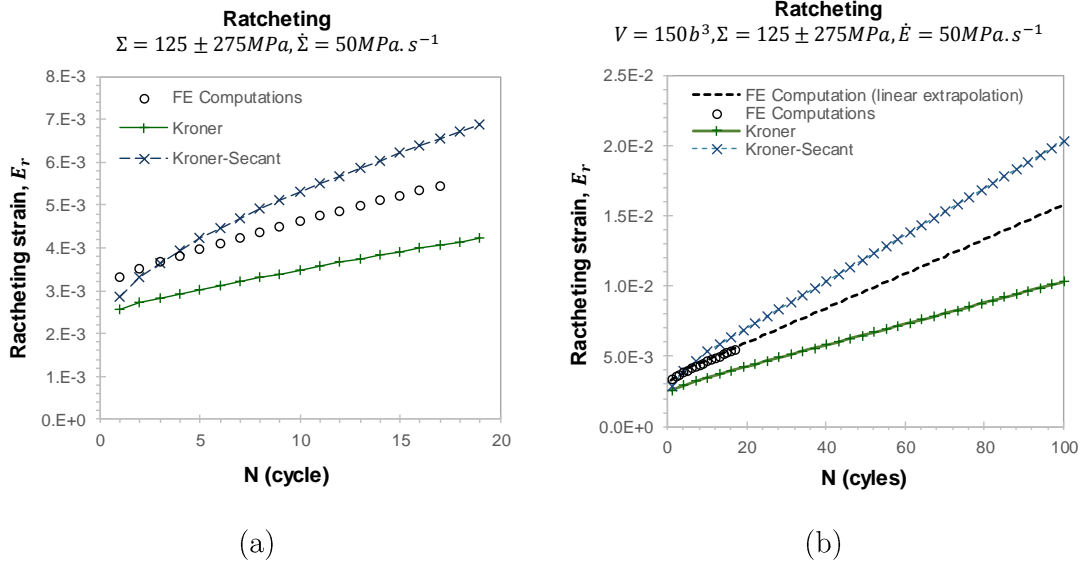


Figure 2.18 (a) Ratcheting strain evolution for a minimum stress of -125 MPa ($\Sigma = 125 \pm 275 \text{ MPa}$) predicted by the self-consistent models and the FE method. (b) Comparison with the linear extrapolation of the FE results.

2.5. Discussion

The predictions of three self-consistent models, the Kröner, Kröner-Tangent and Kröner-Secant approaches, were compared to FE calculations under various loading conditions considering various parameters of viscosity and hardening.

2.5.1. Tensile loading

Among all the self-consistent models tested, the Kröner-Tangent one leads to predictions generally much softer than the FE computations ones, resulting to a large underestimation of the stress level.

Following the initial idea proposed by Mercier and Molinari [167], the additive localization rule takes into account the thermo-elastic interactions at the beginning of loading, tending to become mainly viscoplastic as the strain increases. However, the application of the tangent viscoplastic moduli results in a very short thermo-elastic regime and the predicted curve tends rapidly to the pure tangent viscoplasticity model, as it has been shown by Rachdi [153].

It should be noticed that the Kröner-Tangent formulation predicts very well the behavior of composite materials, where matrix and fiber are in strong contrast [169]. Since crystal anisotropy considered in this work is limited, this model seems inadequate to describe the elastic-viscoplastic behavior of FCC polycrystals.

The Kröner localization rule is usually considered as providing fairly good predictions of the macroscopic behavior at low plastic strains only. But too stiff grain-matrix interactions are expected when the viscoplastic strain increases, resulting in an overestimation of the stress level. Surprisingly, this model results in a reasonable prediction of the tensile curve, even at high plastic strains, with a difference of less than 10% as compared to the FE computation results in an intermediate viscosity domain, without hardening.

Among the three self-consistent models tested here, the more reliable predictions of the strain rate dependent tensile curves with reference to full-field FE calculations are obtained with the Kröner-Secant model. The secant modulus allows a longer thermo-elastic regime than the Kröner-Tangent approach. The transition between thermo-elastic/viscoplastic interactions is not as sharp as that observed if the tangent modulus is used. The ability of the Kröner-Secant self-consistent model to predict the overall behavior of FCC polycrystals under monotonic tensile loading, including stress relaxation and creep.

2.5.2. Elastic inclusion in a creep-deforming matrix

The tangent formulation, using a fourth order tensor to define the tangent viscoplastic moduli of the matrix, was validated by Mercier et al [167] in the case of an elastic-viscoplastic inclusion embedded in an infinite elastic-viscoplastic matrix. These authors shown that the equivalent plastic strain rate in the inclusion predicted by the Mercier-Molinari approach is in fairly agreement with the FE calculations, considering various inclusion shapes and different values of material parameters.

For the sake of simplicity, we consider an isotropic elastic inclusion embedded in an elastic-viscoplastic matrix. The elastic constants for the inclusion are $\Upsilon^{\text{inc}} = 350\text{GPa}$ and $\nu^{\text{inc}} = 0.287$, and the matrix ones are $\Upsilon^{\text{mat}} = 150\text{GPa}$ and $\nu^{\text{mat}} = 0.3$. The matrix behavior is described by the Norton's law [195]:

$$\dot{\epsilon}_{eq} = C \cdot \Sigma_{eq}^n \quad \text{Equation 2.10}$$

Where C and n are the Norton law parameters. The predictions of the self-consistent models are compared with the average inclusion tensile stress computed by the FE method. The FE calculation is carried out using a 2D mesh, developed by Huang [196], considering a quasi-infinite elastic-viscoplastic matrix (gray, Figure 2.19) and a spherical isotropic elastic inclusion (red, Figure 2.19). Symmetry conditions are applied on both bottom and right

side of the considered mesh. A macroscopic tensile stress is applied during the first 48s, reaching a maximum stress $\Sigma_{yy} = 220 \text{ MPa}$.

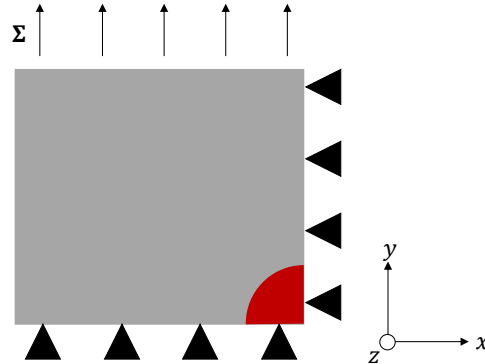


Figure 2.19 2D mesh of the inclusion (red) embedded in a homogeneous matrix (gray). Symmetry conditions are applied on both bottom and right side of the considered mesh [196].

Figure 2.20 presents the evolution of the average inclusion tensile stress. The FE calculations show a quick evolution of the local stress during the loading ramp, followed by quasi-instantaneous saturation. The curve predicted by the Kröner-Secant is slightly underestimated in comparison with the FE one at the beginning of holding time ($t=48s$) (Figure 2.20b). When the holding time increases, the inclusion tensile stress predicted by the Kröner-Secant model keeps increasing, tending to saturation stress plateau (Figure 2.20a). On the contrary, the Kröner model overestimates the inclusion stress already at the end of the loading ramp, just before the onset of creep (Figure 2.20b). Moreover, a stress saturation in the inclusion is not observed because the thermo-elastic interactions (Figure 2.20a). For numerical problems, the calculations based on the Kröner-Tangent local rule did not converge in the applied conditions (Figure 2.20b). Nevertheless, as showed by Mercier et al. [167], this model prediction is in agreement with the FE calculations.

By taking into account the elastic-viscoplastic interactions between the inclusion and the matrix, the Kröner-Secant model allows a rather accurate computation of the stress evolution.

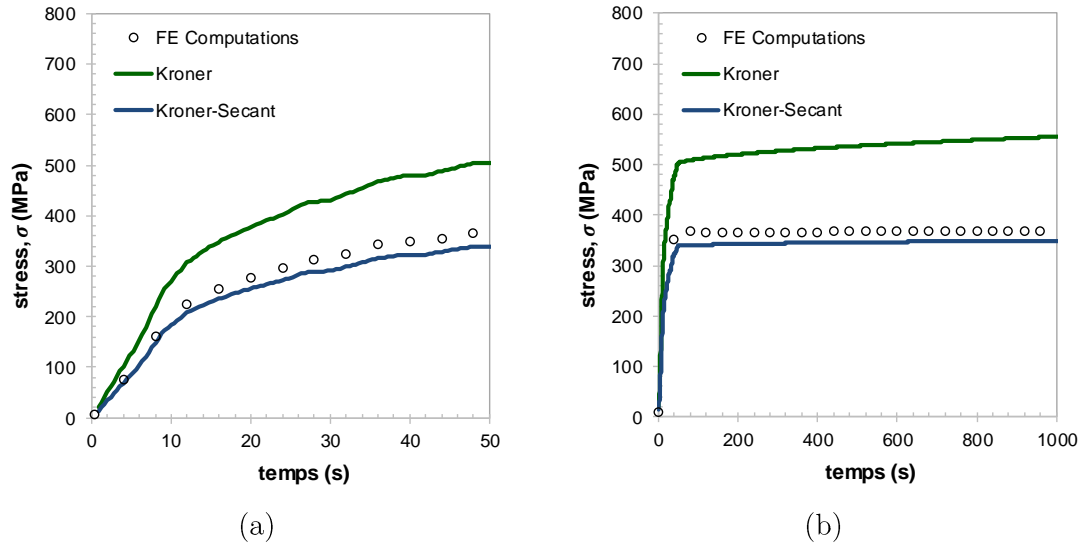


Figure 2.20 Stress evolution of the isotropic elastic inclusion embedded in an elastic-viscoplastic matrix, defined by a Norton's law behavior. Comparison between the self-consistent and the FE computations. (a) Loading ramp (48s) and (b) stress evolution during holding time (1000s).

2.5.3. Cyclic loading

The Kröner and Kröner-Secant models allow reliable predictions of the stress amplitude and stress-strain curves under cyclic deformation by comparison to full-field FE calculations. However, the Kröner-Secant model results in a large overestimation of the ratcheting strain rate under non-symmetrical stress-imposed cyclic loading, comparing to the FE calculations, in the case of low mean stresses ($30 \text{ MPa} < \Sigma_m < 70 \text{ MPa}$). Compared to the references FE calculations, the Kröner model results in better prediction of ratcheting strain in this domain. However, the Kröner-Secant approach seems to provide better predictions of ratcheting as higher mean stress values are applied. In fact, the prediction of the ratcheting effect is a challenging goal since an accurate description of the hysteresis loop is required [197].

In order to improve the description the hysteresis loop, Cailletaud and Pilvin [198,199] proposed the “ β -rule”. This transition scale is defined by a Kröner-type localization rule, modified by the introduction of a phenomenological variable β . The parameters of -rule can be easily identified from cyclic loadings, leading to satisfactory predictions of the ratcheting behavior [199–202]. However, as pointed out by Cailletaud and Saï [203], the weak point of this model is the addition of internal variables requiring more material parameters to be adjusted. The Kröner and the Kröner-Secant models do not require any additional internal variable, neither the adjustment of any additional parameter. It is then interesting to better define the limits of each model on the accurate prediction of ratcheting strain. More calculations under ratcheting loading are in progress to define the loading domain for each self-consistent would be in agreement with the FE computations.

2.6. Conclusions

The Kröner-Secant model is proposed as an alternative localization rule in the elastic-viscoplastic framework, based on the additive scale transition firstly proposed by Mercier and Molinari. Instead of the tangent modulus, which may lead to too soft predictions in the elastic-viscoplastic framework, the proposed model uses the secant modulus to linearize the macroscopic viscoplastic behavior, and it can be straightforwardly implemented.

The predictions of the Kröner-Secant model and those of the Kröner and the Mercier-Molinari models are compared to full-field finite element computations, used as reference, for a large range of viscosity and hardening parameters, under various tensile and cyclic loading conditions.

The following conclusions can be drawn:

- In the rate-insensitive domain, the Kröner-Secant model provides a modified Taylor factor of 2.88, differing by less than 9% from the one provided by the FE computation, 2.6. That value is lower by 15% with respect to the Taylor factor, 3.06.
- Whatever the viscosity regime and strain rate, the Kröner-Secant predictions under tensile loading differ by 5% to 9% from the ones provided by the FE computations. Comparing with the original formulation proposed by Mercier and Molinari, the replacement of the tangent moduli by the secant ones allows a more accurate prediction of the tensile behavior of elastic-viscoplastic polycrystals. The secant formulation results in a delayed transition between the thermo-elastic and the viscoplastic contributions. Whereas the predictions of the Mercier-Molinari model become very close to the Molinari viscoplastic tangent model already at very low viscoplastic strain.
- The Kröner-Secant model allows a very reliable prediction of stress relaxation comparing with the FE calculations, whatever the viscosity parameter.
- The stress amplitude predicted by the self-consistent models and the FE computations are very close under cyclic deformation at low and intermediate viscoplastic strain amplitudes. Comparing to the FE calculations, the Kröner-Secant model better predicts the stress amplitude for $E_a^{vp} > 5.10^{-3}$. Yet, the difference between the Kröner-Secant and the Kröner models remains very low.
- Comparing to the FE computations, the Kröner models slightly underestimates the ratcheting strain in a low mean stress domain. The Kröner-Secant model tends to more accurate predictions of ratcheting in the case of higher mean stresses ($\Sigma_m > 125 MPa$).

As a consequence, the Kröner-Secant model is validated for predicting the overall behavior of FCC polycrystals under tensile loading, relaxation, creep and cyclic deformation, in a large viscoplastic strain rate domain. Since the most part of the ratcheting tests for the 316L(N) SS are carried out using low mean stresses [18,89,97], the Kröner self-consistent model will be preferred when non-symmetrical loadings are concerned while the Kröner-Secant model is recommended to evaluate the viscoplastic behavior of 316L(N) stainless steel.

3 A dislocation-based viscoplastic model applied to the prediction of the mechanical behavior of 316L(N) SS at room temperature

Un modèle polycristallin viscoplastique reposant sur des lois d'évolution des densités de dislocations est proposé afin de prédire le comportement mécanique des aciers inoxydables austénitiques, sous des chargement monotones et cycliques, dans une plage de température entre 293K et 523K. Les lois d'évolution des densités des dislocations coins, vis et de dipôles-coins sont décrites, en tenant compte des mécanismes physiques de production et d'annihilation. Les lois à champs moyens validées précédemment sont utilisées pour prédire le comportement à l'échelle du polycristal. La comparaison entre les prédictions et les résultats expérimentaux montre que le comportement cyclique des aciers inoxydables 316L et 316L(N) peut être décrit en utilisant un nombre réduit de paramètres ajustables, notamment l'énergie d'activation et le volume d'activation. Ces paramètres ont été ajustés par identification inverse à partir des courbes de traction à différentes vitesses de chargement et températures.

A polycrystalline dislocation-based viscoplastic model is proposed in order to predict the tensile and cyclic behavior of austenitic stainless steels in the 293K to 523K temperature range. The evolution laws of the densities of edge, screw and dipole populations of dislocations are described, by accounting for the physical mechanisms of production and annihilation. The comparison between the predictions and corresponding experimental results shows that the cyclic behavior of different 316L/316L(N) stainless steels is reasonably well described. Notably, only two adjusted parameters are used, the activation volume and the activation energy, allowing us to take into account the viscosity properties of these complex alloys, is used and only tensile curves are used in the adjustment procedure.

3.1 Introduction

The tensile and cyclic behaviors of polycrystalline 316L and 316L(N) (nitrogen controlled) austenitic stainless steels (SS) have been largely studied in the last decades. The first studies mainly characterized the macroscopic behavior under different loading conditions, allowing the development and application of different phenomenological models, as reviewed by Chaboche [5], Kang [95], Bari and Hassan [197,204,205], Portier et al. [206] and Sai [207]. These models result in a fair description of the mechanical behavior, provided the simulated loading is not far from the loadings considered in the experimental identification data basis. The extrapolation of experimental results to long term loadings (i.e. long term cyclic-creep, fatigue-relaxation) is often questionable and may lead to very different predictions depending on the considered model, even if the identification process is correct done for all [8]. For these models, the adjustment of the material parameters is generally carried out on an experimental data basis which significantly limits their domain of validity and hence their predictive nature. Moreover, the requirement of a large number of internal variables, having no direct physical meaning, results in the identification of many material parameters. Finally, several sets of parameters may be provided by the identification procedure, leading to different predictions [4].

Based on microscopy observations, different micromechanical models were proposed to predict the behavior of face-centered cubic (FCC) materials, and especially the 316L(N) SS [18,109,201,202,208–213]. Although these models introduce more explicitly the physical mechanisms of plastic deformation at the grain scale, they usually require the adjustment of numerous parameters, involving the incorporation of many experimental results in the identification data base [214].

Gaudin [18] proposed a viscoplastic polycrystalline model describing the evolution of the densities of mobile dislocations, polarized dislocations and dipoles. This approach is based on the composite model, originally proposed by Mughrabi [108], considering zones of low dislocation density, called "channels", and zones with high dislocation density, called "walls". The evolution laws of the densities of the different populations of dislocations are based on five mechanisms, consisting in the multiplication and annihilation of dislocations, creation and annihilation of dipoles and the flux of dislocations at the channel/wall interfaces. This model was later applied by Feaugas and Pilvin [210], to study the heterogeneity of plastic deformation in the 316L(N) SS.

Dong et al. [209] proposed a dislocation-based model considering only one type of dislocation density, with an evolution law based on the Mecking and Kocks equation [215]. Multiplication and annihilation of dislocations are then considered, but not the production/annihilation of dipoles.

Both of these dislocation-based models apply a scale transition law, firstly proposed by Cailletaud and Pilvin [198,199], called “ β -rule”. The β -rule can be easily adapted to cyclic loadings and can be adjusted in order that it matches with the Berveiller–Zaoui approach [157] in the case of proportional tensile loadings. Even if this law has been validated by Cailletaud and coworkers, the adjustment of some additional constants is required using full-field polycrystalline computations [201–203].

The aim of this work is to apply a micro-mechanical modeling to predict the cyclic behavior of 316L/316L(N) stainless steels in the 293K to 523K temperature range. The objective is to propose a model with a number of adjustable parameters as low as possible. By doing so, it is expected to improve the predictive nature of this model. At the crystal scale, the constitutive laws describe the evolution of different populations of dislocations densities. As observed experimentally [28,45,216], mobile edge and screw dislocations are considered. The evolution of dislocations density takes into account the observed mechanisms of multiplication and annihilation of dislocations. Moreover, the production and annihilation of dipoles is also accounted for. As observed experimentally, edge-dipoles are largely present in the dislocation structure for such a kind of material [35,216]. Recent results obtained by discrete dynamic of dislocations and observations carried out on single crystals are used as references on the development of this model. A self-consistent localization rule is used to compute the homogenized stress-strain curves, following the comparisons made between their predictions and reference FE results.

In the previous chapter, the predictions of the self-consistent models proposed by Kröner (thermo-elasticity), Kroner-Tangent (elasto-viscoplasticity) and Kröner-Secant (elasto-viscoplasticity) were compared to full-field finite-element (FE) calculation results. Unlike the “ β -rule”, these rules do not require the adjustment of any additional parameter. In the framework of crystal isotropic elasticity, they are defined only by the elastic shear modulus, μ , the Poisson’s ratio, ν , and the linearized modulus of the macroscopic viscoplastic behavior, η . The tangent modulus is used in the Kroner-Tangent model. The tangent modulus is defined by the ratio between the derivate with respect to time of the macroscopic stress and the viscoplastic strain rate ($\eta_{tan} = \dot{\Sigma}_{11} / \dot{E}_{11}^{vp}$). The Kröner-Secant approach uses the secant modulus, which is defined by the ratio between the macroscopic stress and viscoplastic strain rate ($\eta_{sec} = \Sigma_{11} / \dot{E}_{11}^{vp}$).

The Kröner-Secant model results in a rather fair agreement with full-field FE calculation results of the viscoplastic behavior of FCC polycrystals under tensile loading, relaxation, creep and cyclic deformation. This scale transition rule has thus been chosen for the following calculations. However, in a particular loading range ($\Sigma_{min} < -150 \text{ MPa}$), corresponding to a lot of ratcheting tests, the Kröner model describes more accurately the stress-strain loop evolution due to a better balance between the Bauschinger effect and the

compressive hardening, while the Kröner-Secant rule tends to largely overestimate the ratcheting strain comparing with the FE predictions. Therefore, the Kröner model is applied when cyclic loading displays a non-zero mean stress. At higher mean stress, the Kröner-Secant model is more accurate

In the next section, the constitutive laws are described, accounting for the experimental observations, which are quickly reviewed. The determination of the material parameters and the identification procedure of the crystal viscoplasticity parameters are detailed in Section 3.3, for two sets of alloys. Section 0 is dedicated to the comparison between the simulated curves and the experimental data obtained under various loading conditions. Moreover, a study of the model sensitivity with respect to the material parameters values is presented. Finally, a general discussion is proposed in section 0, wherein a comparison between the proposed model with respect to other polycrystals viscoplasticity models is made.

3.2 Dislocation-based viscoplastic model

3.2.1 Face-centered cubic (FCC) general behavior

At room temperature, the physical process of plastic deformation is mainly dislocation slip on active slip systems. As mentioned by many authors [21,43,107,130,217–220], the crystal/grain orientation affects strongly the tensile and the cyclic stress-strain behavior.

The behavior of FCC single crystals under monotonic deformation was reviewed by Sauzay and Kubin [45] and Caillard et Martin [34]. Three stages of deformation are observed in crystals oriented for single slip. The easy glide stage, or stage I, is characterized by the activation of only one slip system. During this stage, the initial density of forest obstacles is low, resulting in a low hardening rate. Easy glide ends with the activation of a secondary slip system, induced by the increasing of crystallographic rotation. During stage II, the interactions between primary and secondary dislocations may result in the formation of junctions (forest obstacles), increasing the hardening rate. The stage III is defined by the activation of some additional annihilation mechanisms, also called dynamic recovery, referred as annihilations by cross-slip and substantial rearrangements of the dislocation patterns. Single crystals oriented for multiple slip do not present stage I. For such kind of crystals, secondary slips activate simultaneously and the hardening gradient is more important.

The behavior and the evolution of the dislocation structure for a single crystal and a grain embedded in a polycrystal are quite similar under monotonic loading [216]. However, the secondary slip system can be activated much more easily due to the influence of the neighboring grains, resulting in higher hardening slope [18,85].

Under cyclic loading, FCC crystals oriented for single slip (high Schmid factor values) present a plateau in the cyclic stress-strain curve (CSSC) [103,107]. Such a behavior corresponds to the localization of plastic deformation into slip bands, called persistent slip bands (PSB). The PSBs appear essentially in crystals with only one activated slip system and crystals near the [011] crystallographic orientation, and they are able to accommodate the most part of the remote plastic strain [138]. Such structure has also been reported in other FCC metals, with different stacking-fault energy, like Ni [21] and Cu [129,218,221–223], brass [224,225], Cu-16at%Al alloy [113] and the 316L(N) SS [103,107]. The plateau is no longer observed in the case of crystals oriented for multiple slip. A stronger cyclic hardening is observed comparing with single slip oriented crystals. The PSB are rarely observed for such crystals. The activation of multiple slip systems enables in the appearance of labyrinth-like (orientation $\langle 100 \rangle$) [28,219,220,226]. and cell/walls (orientation $\langle 111 \rangle$) microstructures [21,28,219,227].

In the case of polycrystalline 316L(N), the dislocation density evolution result in cyclic hardening, followed by a saturation stage. A softening stage is sometimes observed after the hardening one [16,131]. In the saturated stage, the structure is composed mainly by tangled dislocations, stacking faults and dipoles/multipoles [41,132,133]. At plastic strain amplitude of about 1.10^{-3} , single slip is still observed in most of the grains [139]. At higher viscoplastic strain amplitudes ($E_a^{vp} > 0.5\%$), various dislocations patterns are reported in literature: slip bands, imperfect vein structures, dipolar walls and cells [41,130,131,133,134,228]. The dipolar structures are frequently observed during cyclic loading, but also in monotonic loading [216]. As pointed out by Tippelt et al. [229], dipoles present an upper and lower bound height, wherein they remain stable.

Under uniaxial ratchetting loading of polycrystalline 316L(N), two stages of ratchetting are observed. Stage I is defined as a transition stage, where ratcheting strain rate decreases cycle by cycle [147]. The structure is composed mainly by polarized dislocation tangles and dislocation lines. During stage II, the ratcheting strain rate stabilizes, and dislocation patterns are formed (veins, dipole-walls and dipole-cells) [89,90,146,147].

A more detailed analysis of the deformation mechanisms of 316L(N) SS and the evolution of dislocations patterns is presented in Chapter 1 of this document. Based on the previous microscopic observations a crystalline viscoplastic model is proposed.

3.2.2 Constitutive laws

For the sake of simplicity, the anisotropy of crystal elasticity [75] is not considered in this study. As an alternative, the Young's modulus (\mathbf{Y}) and the Poisson's ratio (ν) are used and assumed to be the same in the matrix and in each individual grain.

For a FCC structure, the dense $\{111\}$ planes and the dense $\langle 110 \rangle$ directions allow the definition of twelve easy slip systems. In each grain, the shear stress, τ_i , results from the projection of the local stress tensor, $\underline{\underline{\sigma}}$, on the i^{th} slip system:

$$\tau_i = \underline{\underline{\sigma}} : (\underline{\mathbf{m}}^i \otimes \underline{\mathbf{n}}^i) \quad \text{Equation 3.1}$$

In Equation 3.1, $\underline{\mathbf{m}}^i$ is the unit vector along the slip direction and $\underline{\mathbf{n}}^i$ the unit vector perpendicular to the corresponding slip plane. The glide of dislocations is possible only when the resolved shear stress (τ_i) on a slip system reaches a critical stress value ($\tau_{c,i}$), corresponding to athermal short range obstacles. According to the theory of thermally activated processes [34], the viscoplastic slip requires a positive effective stress, τ_i^* :

$$\tau_i^* = |\tau_i| - \tau_{c,i} \geq 0 \quad \text{Equation 3.2}$$

The critical or isotropic stress, $\tau_{c,i}$, is evaluated as a function of the dislocation density on all slip systems (j) including (i) itself.

$$\tau_{c,i} = \tau_0 + \mu b \sqrt{\sum_{j=1}^{12} h_{ij} \rho^j} \quad \text{Equation 3.3}$$

where the initial critical resolved shear stress, τ_0 , is considered to be the same for all slip systems. The elastic shear modulus and the length of the Burgers vector are denoted by μ and b , respectively. h_{ij} is a 12x12 matrix, that represents the strength of the interactions between the two slip systems (i) and (j) [47]. The six distinct types of dislocation interactions can be represented by six independent coefficients. The first one describes the self-interactions (h_o). A second coefficient accounts for the coplanar interactions (h_{copla}) and three for forest interactions between non-coplanar slip systems, resulting in the formation of junctions or locks, namely the Lomer–Cottrell lock (h_{Lomer}), the Hirth lock (h_{Hirth}) and the glissile junction (h_{glis}). The last coefficient corresponds to the collinear interactions (h_{coll}). These coefficients have been recently computed by discrete dislocation dynamics for FCC crystals [10].

In this study, three families of dislocations are considered: the edge dislocations segments, noted by the subscript letter e , the screw dislocations segments, noted by s , and the edge-dipolar dislocations, noted by d . That partition holds for each slip system.

The viscoplastic slip rate ($\dot{\gamma}_i^p$) for edge and screw dislocation segments are expressed in Equation 3.4. These expressions reflect the correlation between the viscoplastic slip rate on a slip system and the effective stress. In these equations, T is the temperature, V is the activation volume, Q is the activation energy, κ_b is the Boltzmann constant and ν_D is the

Debye's frequency. The edge and screw dislocations density are denoted as ρ_e^i and ρ_s^i , respectively. Dislocation dipoles are considered as immobile, and not contributing on the slip rate.

$$\dot{\gamma}_{i,e}^p = 2v_D b^2 \rho_e^i \cdot \exp\left(-\frac{Q}{\kappa_b T}\right) \cdot \sinh\left(\frac{V\tau_i^*}{\kappa_b T}\right) \quad \text{Equation 3.4a}$$

$$\dot{\gamma}_{i,s}^p = 2v_D b^2 \rho_s^i \cdot \exp\left(-\frac{Q}{\kappa_b T}\right) \cdot \sinh\left(\frac{V\tau_i^*}{\kappa_b T}\right) \quad \text{Equation 3.4b}$$

A fundamental property in the case of crystalline plasticity is the minimum stress required for the dislocation to move, i.e. the Peierls stress [34]. Considering an elastic-plastic behavior, this stress refers to τ_0 (Equation 3.3). But, dislocation motion is a thermally activated process. Thus the minimal stress to move a dislocation is a function of temperature and the time over which dislocation motion is observed [33]. In the case of elastic-viscoplasticity, this necessary energy can be attributed mainly to the viscoplastic parameters, controlling the thermo-activated mechanisms (cf. Section 3.3.4). The necessary stress can then be related to the ratio between the activation energy and the activation volume ($\tau_0 \approx Q/V$).

The evolution laws of each population of dislocations are associated to the mechanisms observed experimentally at room temperature, for FCC metals. Equation 3.5 and Equation 3.6 describe edge and screw dislocations density rate, respectively. These equations are defined by a first term, describing the multiplication mechanism, and a second one, representing the annihilation mechanisms. In addition, a third term is introduced in the edge dislocations density rate, related to the creation of dipoles. Equation 3.7 describes the dipoles density rate, $\dot{\rho}_d$, including a creation and an annihilation terms.

$$\dot{\rho}_e^i = \frac{2}{bL} \cdot \dot{\gamma}_s^i \cdot \text{sign}\left(\frac{\dot{\gamma}_s^i}{\gamma_s^i}\right) - \frac{2y_e}{b} \cdot \rho_e^i \cdot |\dot{\gamma}_e^i| - \dot{\rho}_d^i \quad \text{Equation 3.5}$$

$$\dot{\rho}_s^i = \frac{2}{bL} \cdot \dot{\gamma}_e^i \cdot \text{sign}\left(\frac{\dot{\gamma}_e^i}{\gamma_e^i}\right) - \frac{2y_s}{b} \cdot \rho_s^i \cdot |\dot{\gamma}_s^i| \quad \text{Equation 3.6}$$

$$\dot{\rho}_d^i = 2\rho_e^i \cdot \frac{h_{max} - y_e}{b} \cdot |\dot{\gamma}_e^i| - \frac{2y_e}{b} \cdot \rho_d^i \cdot |\dot{\gamma}_e^i| \quad \text{Equation 3.7}$$

L is the mean-free path of mobile dislocations, y_e and y_s are the maximum distances of annihilation, respectively, of edge and screw dislocations and h_{max} is the maximum dipole stable height. In the next sub-sections, the mechanisms of multiplication and annihilation of dislocations and the mechanisms of production and annihilation of dipoles will be described.

3.2.2.1 Mechanism of multiplication of dislocations

The multiplication of dislocations is based on a process of “bowing-out” of Frank-Read sources [230] (Figure 3.1a). For the sake of simplicity, the curved Frank-Read loops are considered to be in a rectangular shape, with two edge and two screw segments (Figure 3.1b).

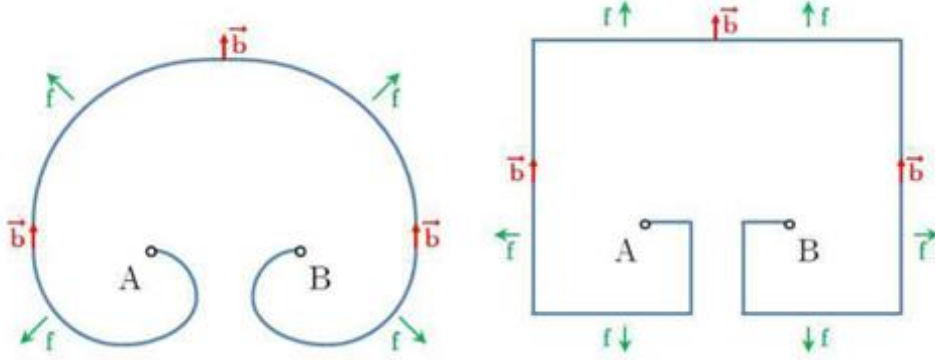


Figure 3.1. Diagram showing a typical loop of Frank-Read (a) and the modeled loop with edge and screw segments (b).

Considering Figure 3.1b, the gliding of the screw segments during the bowing-out process induces an increase in the length of the two edge segments, and vice versa. The opposite mechanism takes place during backward loading (bowing-in), when the direction of the applied resolved shear stress changes [231]. Figure 3.2 shows a schematic representation of the effect of the backward gliding. The loading direction is taken into account by the change in the multiplication term’s sign in Equation 3.5 and Equation 3.6, resulting in the total reversibility of the edge and screw dislocations production.

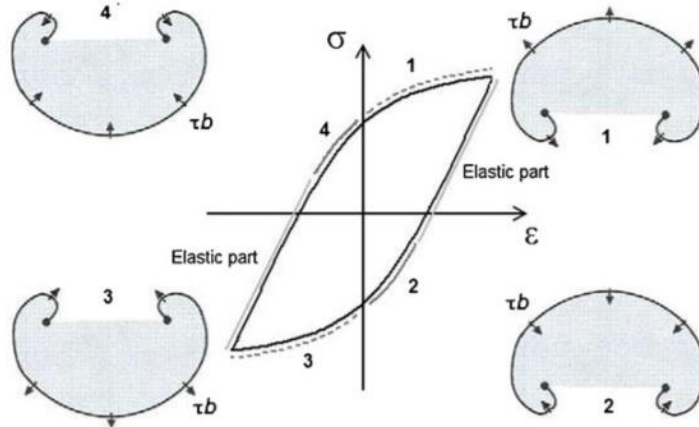


Figure 3.2 Diagram of a Frank-Read source on an active slip system. Bowing-out and bowing-in mechanisms [121].

According to Mughrabi [232], the irreversibility of dislocation glide increases when cross-slip occurs. The probability of irreversibility strongly decreases at low plastic strain amplitudes and for material with low stacking fault energies (γ_{SFE}). At room temperature,

the γ_{SFE} of 316L(N) SS varies between 15 mJ.m^{-2} to 30 mJ.m^{-2} [41,89,216,233]. A low probability of cross-slip is observed for the 316L(N) SS and the cyclic slip irreversibility can be neglected [232].

The mean distance that a mobile dislocation glides along the crystalline matrix before being stopped by pinning obstacles (forest interaction) is denoted by the mean free-path, L (Equation 3.5 and Equation 3.6). According Estrin and Mecking [234], the mean free-path of dislocations may be estimated by two additive terms, associating the effect of the grain size and the forest obstacles.

$$L = \frac{1}{\phi} + \frac{\kappa}{\sqrt{\rho_t}} \quad \text{Equation 3.8}$$

Kubin et al. [10] showed that the mean free-path is directly related to the number of active forest slip systems. They proposed to describe the mean free-path as dependent on the crystal orientation or more generally on the densities on the various easy slip systems, which results in a dislocation storage rate equation defined by the sum of different contributions: the self-interaction, the forest interactions (Hirth, Lomer and glissile) and the coplanar interaction.

In the following, a simpler equation is used to describe the mean free-path as a function of the total dislocation density (ρ_t) and the mean grain size, ϕ :

$$L = \min\left(\phi, \frac{\kappa}{\sqrt{\rho_t}}\right) \quad \text{Equation 3.9}$$

At the beginning of viscoplastic deformation, when the obstacles density is low, the mean grain size better characterizes the mean free-path of a mobile dislocation. When the viscoplastic deformation increases, the density of obstacles increases and the mean free-path is a function of the dislocations density. For sake of simplicity, the mean free-path is considered to be the same for both edge and screw dislocations.

In order to better accounting the dependence of the mean free-path on the crystal orientation, the parameter κ should be adjusted for different crystal orientations, in relation with the number of active systems. Rachdi [153] determined the values of κ for single slip ($\kappa_{single} = 300$) and multiple slip ($\kappa_{multi} = 30$) orientations from tensile curves of copper single crystals. As pointed out by Kubin et al. [10], the number of obstacles is lower for crystals oriented for single slip, resulting in both long mean free-paths and a large value of κ_{single} . Crystals oriented for multiple slip are characterized by a larger number of forest obstacles, leading to a short mean free-path and a low value of κ_{multi} .

Following the same approach as the one of Rachdi [153], the mean free path parameters for 316L SS alloy will be measured using tensile curves of single crystals of different orientations (cf. Section 0).

3.2.2.2 Mechanism of annihilation of dislocations

When two parallel dislocations of different signs are close enough, a spontaneous annihilation of dislocations takes place [235]. The critical annihilation distances for edge and screw dislocations are expressed as y_e and y_s , respectively.

3.2.2.2.1 Annihilation of edge dislocations

Experimental measurements of the heights of the edge-dipoles allowed an estimation of the critical annihilation distance of edge dislocations (y_e^{exp}). Table 3.1 summarizes the values of y_e^{exp} measured for various FCC metals/alloys. The critical annihilation distance of edge dislocations depends mainly on the temperature, but also on the $\gamma_{SFE}/\mu b$ [210].

Table 3.1. Critical annihilation distance measure (y_e^{exp}) for edge dislocations in different FCC metals/alloys at room temperature

FCC metal/alloy	$\gamma_{SFE}/\mu b(10^{-3})$	$y_e(\text{nm})$	Ref.
316L(N)	1.6	1.2	[35,216]
Cu	4.7	1.6	[235]
Ni	5.9	1.6-2	[229,236]
Al	19.6	3	[118]

Theoretically, edge dislocations of opposite signs annihilate if the distance between their gliding plane is lower than [237]:

$$y_e^{calcul} = \frac{\mu b^4}{2\pi(1-\nu)E_{vac}} \quad \text{Equation 3.10}$$

Where E_{vac} denotes the vacancy-formation energy. Considering for 316L(N) SS: $b = 2.54 \cdot 10^{-10} \text{ m}$ [3], $\mu = 75 \text{ GPa}$ [18] and $E_{vac} = 1.4 \text{ eV}$ [238], the theoretical critical distance of annihilation y_e^{calcul} is estimated at approximately 0.3 nm, far lower than the measured value of 1.2 nm. According to Tippelt et al. [229], the difference between the calculated and the measured distances is expected, since the supersaturation of vacancies in fatigued crystals is not taken into account in Equation 3.10. However, for copper the theoretical value is in agreement with the one calculated from molecular dynamics: $y_e^{calcul} = 0.38 - 0.63 \text{ nm}$ [239,240].

The measured value, $y_e^{exp} = 1.2 \text{ nm}$, is firstly applied on the prediction of the mechanical behavior of 316L/316L(N) S. A comparison between the calculated curves using the experimental and the theoretical values is presented in Section 3.4.5.2.

3.2.2.2.2 Annihilation of screw dislocations

For screw dislocations, the annihilation mechanism is assisted by cross-slip, depending strongly on the elastic interactions between dislocations and temperature [45]. Screw dislocations can be annihilated very easily as they are able to cross-slip, thus the screw critical annihilation distance of screw dislocations is much higher than the edge one [28].

From TEM observations carried on a 316L(N) SS alloy, Feaugas [216] measured a critical annihilation distance (y_s^{exp}) of about 15 nm. Comparing this value with the ones obtained for various FCC metals, Feaugas observes a clear dependency of y_s^{exp} with the normalized stacking fault energy, $\gamma_{SFE}/\mu b$, and by consequence, with the cross-slip ability (Figure 3.3). As a consequence, the critical annihilation distance of screw dislocations increases when the temperature increases or when the strain rate decreases [28].

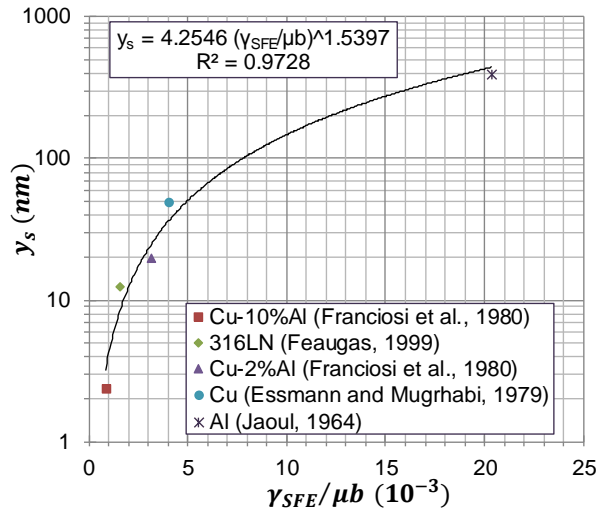


Figure 3.3 Screw dislocation annihilation distance, y_s , as a function of the normalized stacking fault energy. Experimental data from: [46,216,235,241]. Figure adapted from [216].

The measured value, $y_s^{exp} = 15$ nm, is firstly applied on the prediction of the mechanical behavior of 316L/316L(N) SS. A sensitivity analyse with respect to this parameters is presented in Section 3.4.5.2.

3.2.2.3 Mechanism of production and annihilation of dipoles

As mentioned previously, dipolar structures are commonly observed in 316L(N) SS during cyclic loading but also during tensile loading [216]. A dipole is formed by two edge dislocations gliding in opposite directions and separated by distance ranges between the critical annihilation distance, y_e , and the maximum stable dipole height, h_{max} . Figure 3.4 shows schematically the conditions for the formation of a dipole and for its annihilation.

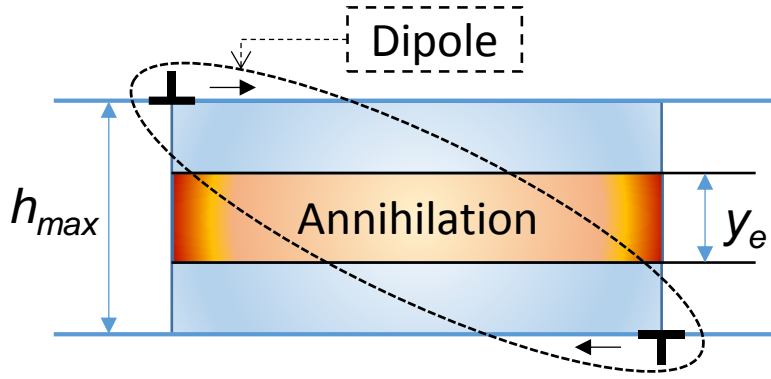


Figure 3.4. Diagram showing the critical annihilation distance, y_e , and the maximum stable dipole height, h_{max} .

The dipole height has been experimentally measured for different FCC metals: copper [242], nickel [229], aluminum [118,243] and 316L(N) SS [216,35,244] at different temperatures. For 316L(N) SS under tensile loading at room temperature, Feaugas [216] measured a mean dipole height ranging between 50 nm and 130 nm. As pointed out by Catalao et al. [35], the distribution of the dipoles heights depends not only on the considered grain, but also on the applied loading.

In fact, the maximum stable dipole height depends on the critical resolved shear stress acting on the two edge dislocations. According Tippelt et al. [229], if the applied stress is high enough, the dislocations of the dipole can be separated. Differt and Essmann [231] proposed the following equation, describing the maximum stable dipole height under cyclic loading as a function of the critical shear stress.

$$h_{max} = \frac{\mu b}{8\pi(1-\nu)\tau_{c,i}} \quad \text{Equation 3.11}$$

The maximum stable dipole height calculated with Equation 3.11 is in agreement with the experimental measures for the nickel [229], aluminum [243] and 316L(N) [35]. This equation is used in the following to determine maximum stable dipole height, h_{max} .

Dipole annihilation occurs if an edge dislocation passes through the two dislocations of the dipole (annihilation area plotted in Figure 3.4). In this case, the free dislocation can react with the dislocation of opposite sign, resulting in a spontaneous annihilation of these two dislocations and, as a consequence, the decomposition of the dipole.

The description of the production and annihilation of edge-dipoles mechanisms lead to the positive and negative terms of Equation 3.7, respectively. Following the Essmann and Differt hypotheses [245], for the dipole evolution law is assumed that there are as many negative edge dislocations as positive ones.

3.2.2.4 Self-consistent model

The Kröner-Secant self-consistent model presented in detail in Chapter 2 is used as scale transition rule. This approach can be written by:

$$\underline{\underline{\dot{\sigma}}} = \underline{\underline{\dot{\Sigma}}} + 2\mu(1 - \beta) \left(\underline{\underline{\dot{E}^{vp}}} - \underline{\underline{\dot{\epsilon}^{vp}}} \right) + 2\mu(1 - \beta) \eta^{-1} \left(\underline{\underline{\Sigma^d}} - \underline{\underline{\sigma^d}} \right) \quad \text{Equation 3.12}$$

with $\beta = \frac{2(4-5\nu)}{15(1-\nu)}$ and $\eta = \frac{\Sigma_{11}}{\dot{E}_{11}^{vp}}$

where $\underline{\underline{\dot{\sigma}}}$ and $\underline{\underline{\dot{\epsilon}^{vp}}}$ are the average grain stress and inelastic strain rate tensors and $\underline{\underline{\dot{\Sigma}}}$ and $\underline{\underline{\dot{E}^{vp}}}$ are their averages at the polycrystal scale. The deviatoric stress tensors at the crystal and the polycrystal scales are denoted as $\underline{\underline{\sigma^d}}$ and $\underline{\underline{\Sigma^d}}$, respectively. $\eta = \frac{\Sigma_{11}}{\dot{E}_{11}^{vp}}$ is the secant modulus.

This mean-field model has been validated by comparison to full-field FE calculation of the behavior of FCC polycrystals under various loading conditions (tensile loading, relaxation, creep, cyclic deformation) in a large viscoplastic domain. However, the Kröner-Secant model tends to largely overestimate the ratcheting strain under cyclic loading with non-zero mean stress. In that case, the Kröner self-consistent rule is preferred. Kröner approach is obtained by setting $\eta^{-1} = 0$ in Equation 3.14.

The calculations are carried out using the SiDoLo software [182], using Fortran subroutines, to solve the above differential equations. A random crystal distribution of 100 grains is considered, allowing an overall isotropic behavior of the polycrystal. As shown in previous chapter (Figure 2.1), 100 grains allow an accurate description of the overall and local behaviors in a reasonable computation time.

3.3 Determination of material parameters and adjustment of the viscoplasticity parameters

3.3.1 Set of experimental data

Experimental data taken from literature are used to evaluate the predictions of the model. These data originate from various 316L and 316L(N) SS sheets. The experimental results have been arranged in two set of materials as a function of the chemical composition. The first set corresponds to experimental data from 316L(N) SS [3,18,97,246] and the second set merges experimental data from 316L SS [89,206]. Table 3.2 summarizes information about the two sets of materials, with the corresponding chemical composition, Young's modulus (\mathbf{Y}) and the mean grain size.

Table 3.2. The two considered sets of stainless steels and the respective chemical compositions, Young's modulus and mean grain size.

Group	Chemical composition (wt.%)	Υ	ϕ	Ref.
316L(N) SS	C=0.030; N=0.077; Cr=17.5; Ni=12.46; Mo=2.48; Mn=1.88; Si=0.44; P=0.028	195 GPa	53 μm	SQ [18]
	C=0.026; N=0.069; Cr=17.27; Ni=12.13; Mo=2.54; Mn=1.74; Si=0.31; P=0.025;		50 μm	Avesta [3]
	C=0.025; N=0.070; Cr=17.52; Ni=12.07; Mo=2.38; Mn=1.21; Si=0.43; P=0.021;		100 μm	[97,246]
316L SS	C=0.016; Cr=18.05; Ni=11.25; Mo=2.58; Mn=1.42; Si=0.71; P=0.05	185 GPa	56 μm	[89]
	C=0.018; Cr=16.7; Ni=11.08; Mo=2.13; Mn=1.62; Si=0.35; P=0.024		30 μm	[93,206]

3.3.2 Determination of material parameters

Table 3.3 summarizes the physical constants and materials parameters used in the model. The six coefficients of the strain hardening matrix, h_{ij} , were computed by means of the discrete dislocations dynamics for FCC crystals [10]. The critical annihilation distances, y_e and y_s , are taken from measurements made on the 316L(N) SS [216]. The value of the initial dislocation density in the annealed state is taken from the measurement Gaudin [18] on the 316L(N) SS (SQ sheet), where $\rho_0=10^{10} \text{ m}^{-2}$. It is considered that the total initial dislocation density is equally distributed between edge and screw dislocations.

Table 3.3. List of constants and crystalline parameters for both sets of stainless steels. Cst.: physical constants; Exp.: experimental data; DD: dislocation dynamics simulations.

Parameters	Value	Ref.	
κ_b	Boltzmann constant	$1.38 \cdot 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$	[34] Cst.
ν_D	Debye frequency	10^{13} s^{-1}	[34] Cst.
b	Burgers vector magnitude	$2.54 \cdot 10^{-10} \text{ m}$	[3] Exp.
ν	Poisson's ratio	0.33	[3] Exp.
y_e	Annihilation distance of edge dislocations	1.2 nm	[216] Exp.
y_s	Annihilation distance of screw dislocations	15 nm	[216] Exp.
h_0	Self-interactions	0.122	[10] DD
h_{copla}	Coplanar interactions	0.122	[10] DD
h_{Lomer}	Lomer–Cottrell lock	0.122	[10] DD
h_{Hirth}	Hirth lock	0.070	[10] DD
h_{glis}	Glissile junction	0.137	[10] DD
h_{coll}	Collinear interactions	0.625	[10] DD
ρ_0	Initial dislocation density	10^{10} m^{-2}	[18] Exp.

3.3.3 Adjustment of the mean free-path parameters

As mentioned in the Section 3.2.2.1, the mean free-path parameters κ_{single} and κ_{multi} are determined from tensile tests performed on 316L SS monocrystals at room temperature with different orientation with respect to the loading direction.

The experimental data reported by Karaman et al. [14] for a tensile direction close to the crystallographic axis [100], [111] and [123] have been used for the identification process. The corresponding calculation has been performed considering an ideal elastic-plastic regime, even if the 316L/316L(N) SS present a non-negligible viscoplastic behavior at room temperature (cf. 3.3.4). A very high activation volume is used ($V=10000b^3$, $Q=1.5eV$) and an initial critical shear stress, τ_0 , of 90 MPa is considered [14]. Figure 3.5 compares the simulated curves with the experimental ones. In order to check the effect of the initial shear stress on the hardening stress ($\tau - \tau_0$), calculation were carried out by dividing and multiplying the value of τ_0 by a factor of 2.

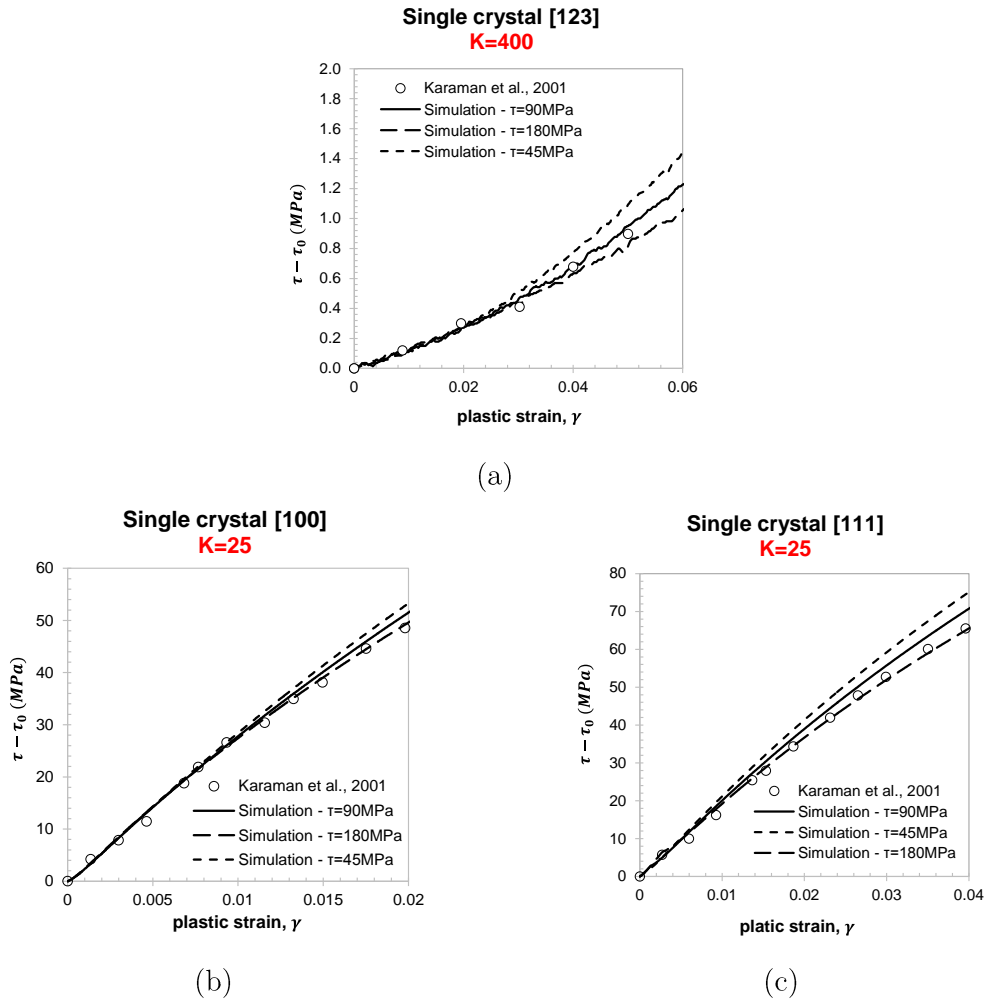


Figure 3.5. Adjustment of the free-mean path parameter for different single crystals orientations: (a) Single-slip orientation [123]; (b) multiple-slip orientation [100], and multiple-slip orientation [111]. Experimental data of 316L single crystals at room temperature taken from [14].

These curves show clearly the dependence of the mean free-path to the crystal orientation. For crystal oriented for single slip, when the tensile direction is close to [123] axis, this value is identified as $\kappa_{single} = 400$. In the case of multiple slip crystals, in the case of [100] and [111] orientations, $\kappa_{multi} = 25$. These values are in fair agreement with those computed by Kubin *et al.* [10], via discrete dislocation dynamics computations.

From Figure 3.5, one can observe an irrelevant effect of the initial critical stress on the material hardening. In the case of multiple slip crystals, the flow stress is affected by less than 3 MPa (<4%) at $\gamma^p = 2\%$. For the single slip crystals orientation, the difference is lower than 0.05 MPa (<5%).

3.3.3.1 Partition of the standard triangle in two families

The orientation of the tensile axis with respect of the crystallographic orientation can be represented in a standard triangle. Schwab and Holste [247] proposed to report in the standard triangle two families of crystal orientations, according to the observed dislocation microstructures. The first family assembles the crystals well-oriented for single slip. The corresponding tension-compression axis is located in the central part of the standard triangle (ST). The second family gathers the crystals oriented for multiple slip, located at the periphery of the ST. A similar partitioning procedure is applied in this work.

For any crystal orientation, one defines the ratio between the highest shear stress ($\tau_{primary}$) and the second highest ($\tau_{secondary}$): $R = \tau_{secondary}/\tau_{primary}$. The isovalues of R are shown in Figure 3.6 [20]. The distinction between the two families is done by a critical value (R_{crit}). Crystals well-oriented for single slip present a ratio lower than R_{crit} and grains oriented for multiple slip a ratio higher than R_{crit} . From transmission electron microscopy (TEM) observations of the slip features [18], the critical ratio value for a 316L(N) SS at RT has been determined as $R_{crit} = 0.97$ (Figure 3.6).

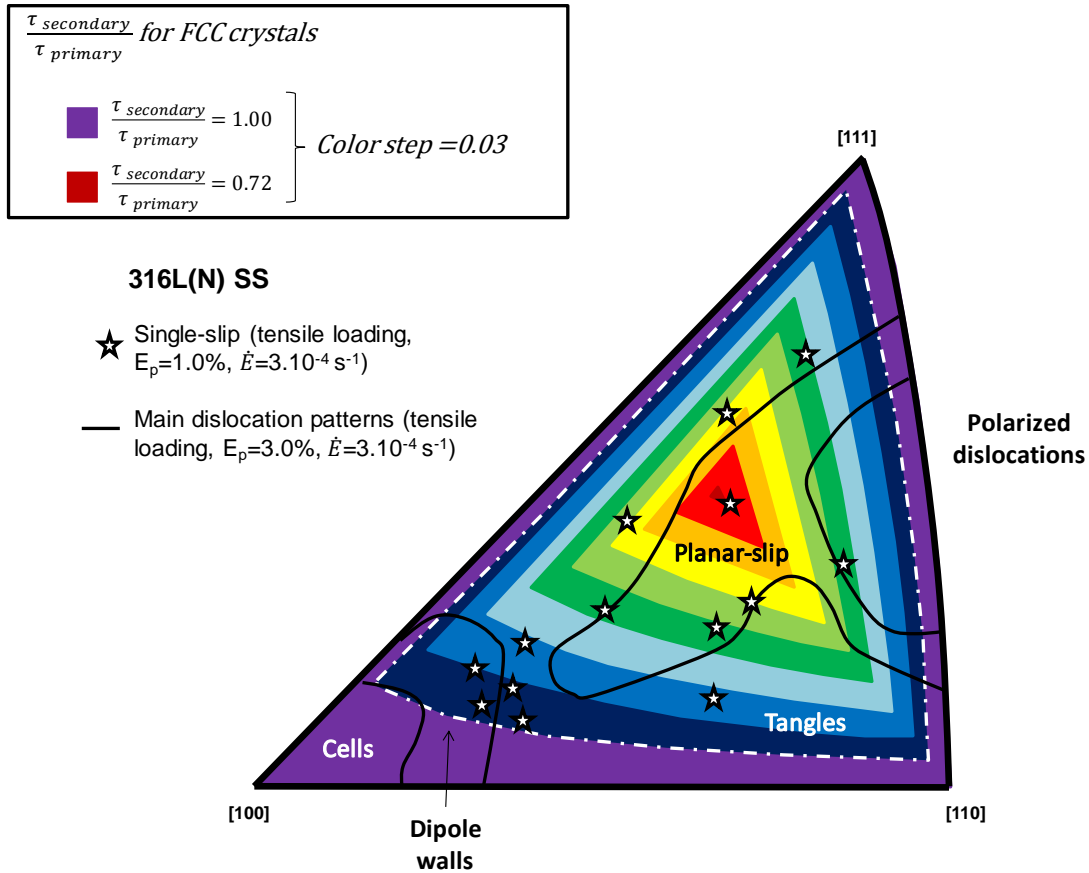


Figure 3.6. Iso-values of the ratio between $|\tau_{secondary}/\tau_{primary}|$ plotted in the standard crystallographic triangle. The indicated dislocation patterns, observed by TEM for a 316L(N) SS, are taken from [18].

3.3.4 Adjustment of the crystalline viscoplasticity parameters

In the elastic-viscoplastic regime, the thermally-activated interaction between gliding dislocation and short-range obstacles can be described by using the viscoplasticity parameters: activation volume, V , and activation energy, Q . Then, the effect of solid solution atoms and swell precipitates is described by these thermally-activated interactions and the initial resolved shear stress, τ_0 , is taken as zero.

The viscoplasticity parameters, related to the thermally-activated mechanisms, are adjusted from experimental curves of polycrystalline materials, by inverse identification. Since thermally-activated processes mainly depend on temperature and on viscoplasticity strain rate [34], the adjustment of the viscoplastic parameters is made by using tensile curves at different strain rates and temperatures.

The physical mechanisms of viscoplastic deformation are considered to be similar between 293K and 523K. At higher temperatures ($T > 523\text{K}$), other physical mechanisms, such as dynamical strain ageing (DSA) and dislocation climb, play an influent role in the viscoplastic deformation [63,64,135,244]. The identification process and the validity of the model are thus limited to the temperature range 293-523K.

The values of the two parameters adjusted for each material set are presented in Table 3.4. The ratio between the activation energy and the activation volume, Q/V , indicates the necessary stress without thermal activation. The simulated curves using these parameters are shown in Figure 3.7

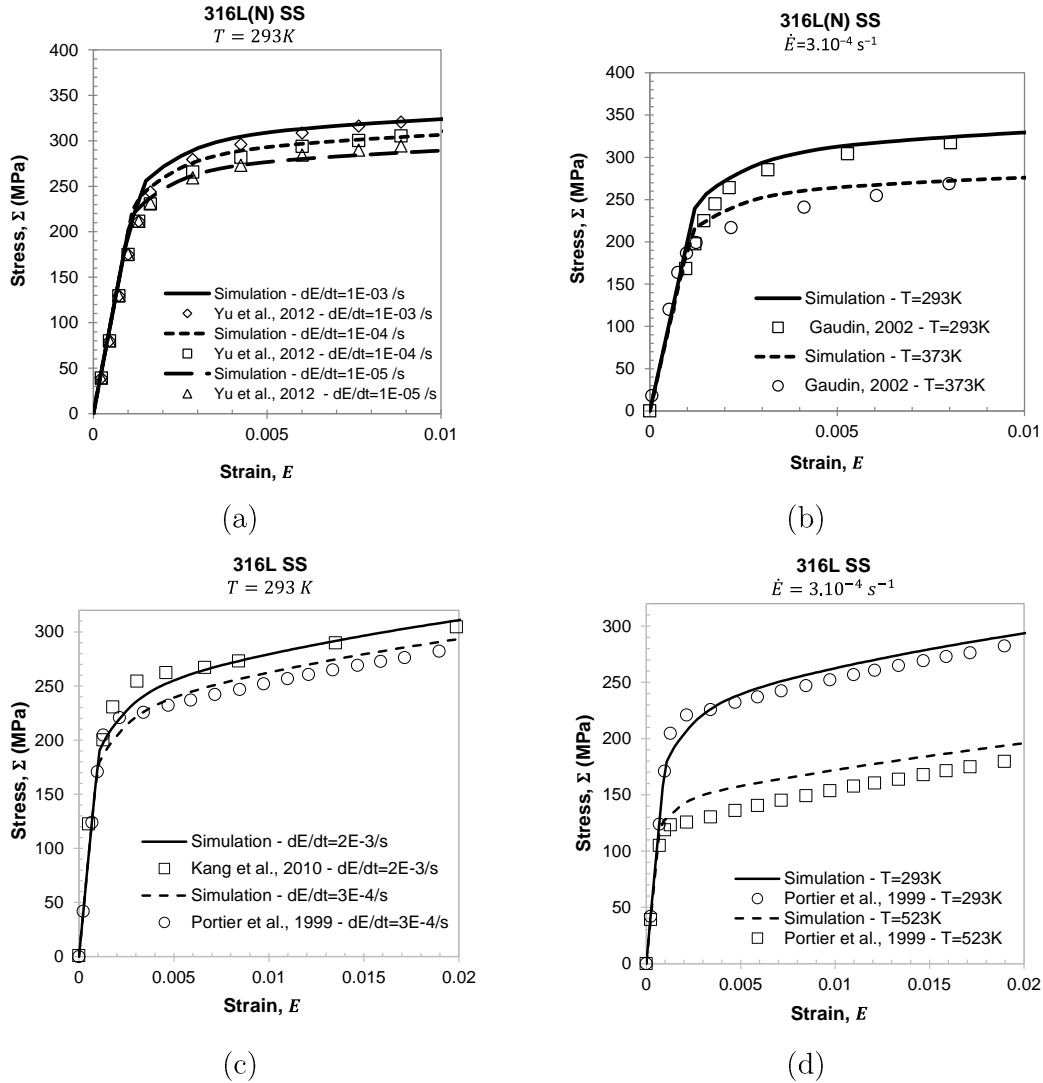


Figure 3.7 Comparison between the simulated curves and the experimental data. Adjustment of the crystalline viscoplasticity. 316L(N) SS, different strain rates at room temperature (a) and different temperatures (b). 316L SS, different strain rates at room temperature (c) and different temperatures (d).

Table 3.4. List of the parameters related to thermally-activated glide for each material set, with the corresponding ratio between the activation energy and the activation volume (Kröner-Secant model).

316L(N) SS	316L SS
$V=90b^3$; $Q=1.5$ eV	$V=140b^3$; $Q=1.55$ eV
$Q/V = 163.0$ MPa	$Q/V = 112.4$ MPa

3.4 Validation of the proposed model

For each set of materials, the model predictions are compared with experimental data obtained under various loading conditions (tensile loading, relaxation, cyclic deformation and ratcheting). The experimental loading parameters (strain rate, stress rate, time, temperature, etc.) are used in the calculations.

3.4.1 Dislocation density under tensile loading

Gaudin [18] measured the dislocation density in a population between 50 to 100 grains after tensile loading at different strain levels of 316L(N) SS at RT. The evolution of the whole average dislocation density and the respective standard deviation, considering the densities measured each grains population, are shown in Figure 3.8 as a function of the remote viscoplastic strain. The measured and computed densities are compared. In each grain, the corresponding calculated dislocations density are computed by considering edge, screw and dipoles in all slip systems as experimentally. The predicted average value is obtained by considering 100 grain orientations. The predictions shown in Figure 3.8 are in rather fair agreement with the measurements.

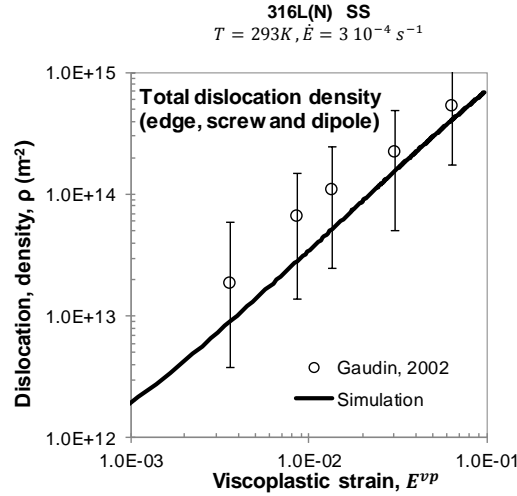


Figure 3.8 Comparison between measured and computed dislocation densities. Both average and standard deviation values are plotted. 316L(N) SS, tensile loading, $\dot{E} = 3.10^{-4} \text{ s}^{-1}$, at RT [18].

3.4.2 Relaxation tests

Relaxation tests carried out on 316L SS at room temperature after initial tensile loading at $\Sigma_0 = 250 \text{ MPa}$ and $\Sigma_0 = 200 \text{ MPa}$ are presented in Figure 3.9 [4]. The corresponding calculated curves describe well the viscous behavior of the alloy at room temperature. As presented in Chapter 2, the Kröner-Secant approach allows reliable predictions of stress relaxation.

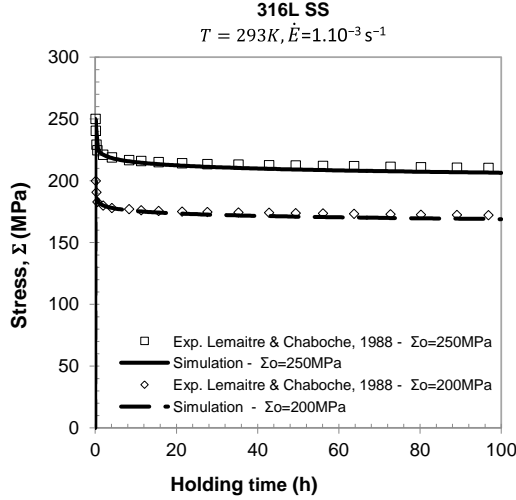


Figure 3.9 Stress relaxation at room temperature. 316L SS at room temperature [4].

3.4.3 Cyclic deformation

The calculated cyclic stress-strain response of the 316L(N) SS (Avesta sheet) is compared to experimental results [3] in Figure 3.10.

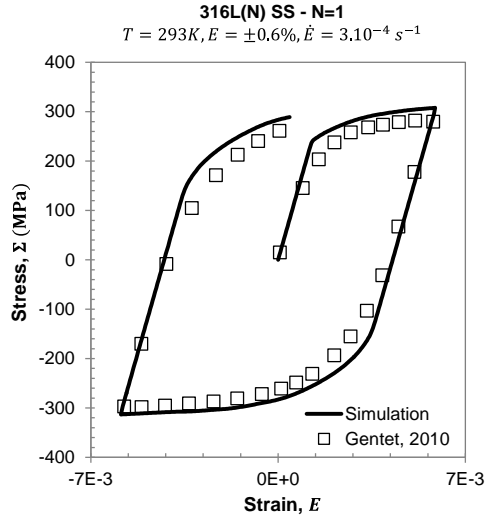


Figure 3.10. 1st stress-strain loops. 316L(N) SS (Avesta sheet) tested in uniaxial cyclic loading, with $E = \pm 0.6\%$ and $\dot{E} = 3.10^{-4} s^{-1}$, at room temperature [3].

The shape of the loop at the 1st cycle is rather well described. Nevertheless, a slight difference between the experimental and the calculated yield points can be observed. The absolute values of the calculated yield stresses are higher than as the experimental ones. Thus, the proposed model tends to overestimate the isotropic stress.

The stress amplitude evolution as a function of the number of cycles at RT, 323K and 473K are plotted in Figure 3.11. The cyclic hardening is reasonably well described by the proposed model at RT and 323K. However, cyclic softening is observed experimentally, while cyclic hardening is continuously predicted by the model, resulting in a slight

overestimation of the stress amplitude after 50 cycles. At 473K, the model underestimates the hardening during the first cycles, but the final plateau value is well predicted.

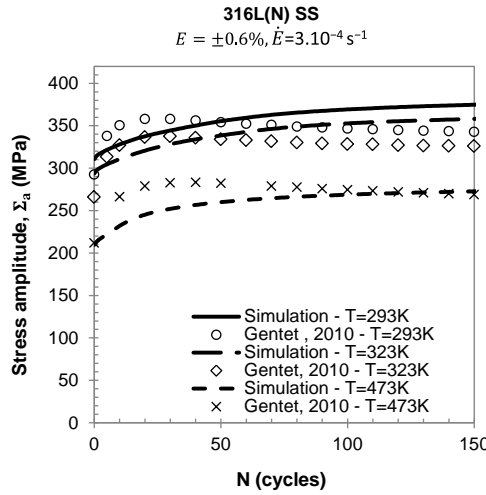


Figure 3.11. Stress amplitude evolution tested in uniaxial cyclic loading. 316L(N) SS (Avesta sheet) with $E = \pm 0.6\%$ and $\dot{E} = 3.10^{-4} s^{-1}$, at different temperatures [3].

Figure 3.12 shows the evolution of the three populations of dislocation densities (edge, screw and edge-dipoles) and the total dislocation density during cyclic deformation loading at room temperature. During the first 30 cycles, the dislocation density increases rapidly. The dislocation density rate decreases with the cumulative viscoplastic strain ($E_{cum}^{vp} = 4 \cdot N \cdot E_a^{vp}$) increasing until approximately 200 cycles, when the dislocation density tends to stabilization. The increase of edge-dipoles density is the most significant. At the saturation stage, the majority of dislocations are dipoles. The edge dislocations represent 21% of the total dislocations and the screw dislocations 14%. At the saturation state, the total dislocation density ($\rho^{calcul} = 3.6 \cdot 10^{14} m^{-2}$) is in rather fair agreement with Pham et al. [131] measurements ($\rho^{exp} = 2.4 \cdot 10^{14} m^{-2}$).

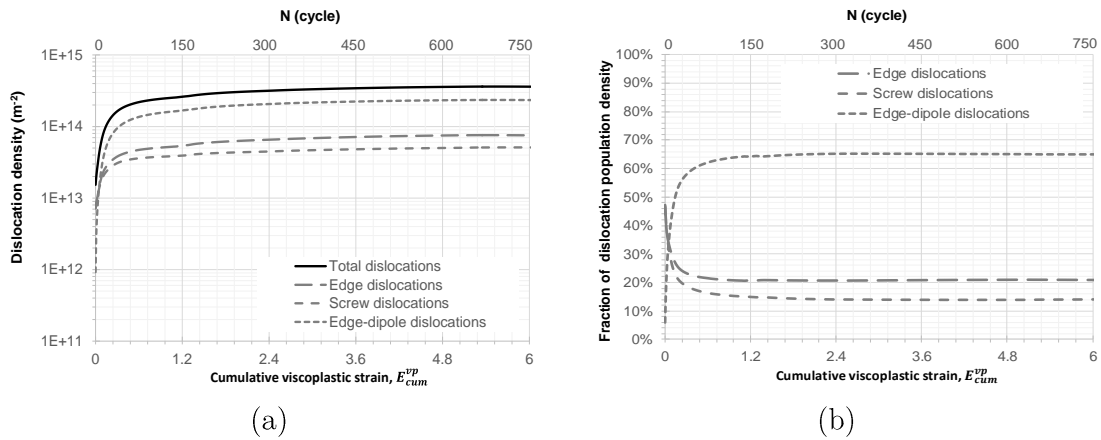


Figure 3.12 (a) Evolution of the predicted dislocation densities in function of the number of cycles. (b) Percentage of each population of dislocations with respect to the total dislocation density. 316L(N) SS, $E = \pm 0.6\%$ and $\dot{E} = 3.10^{-4} s^{-1}$ at RT.

The experimental and computed cyclic stress-strain curves for the 316L(N) SS are presented in Figure 3.13. The model describes reasonably well cyclic stress-strain curves in a large range of viscoplastic strain, from $E_a^{vp} = \pm 0.1\%$ to $E_a^{vp} = \pm 0.8\%$.

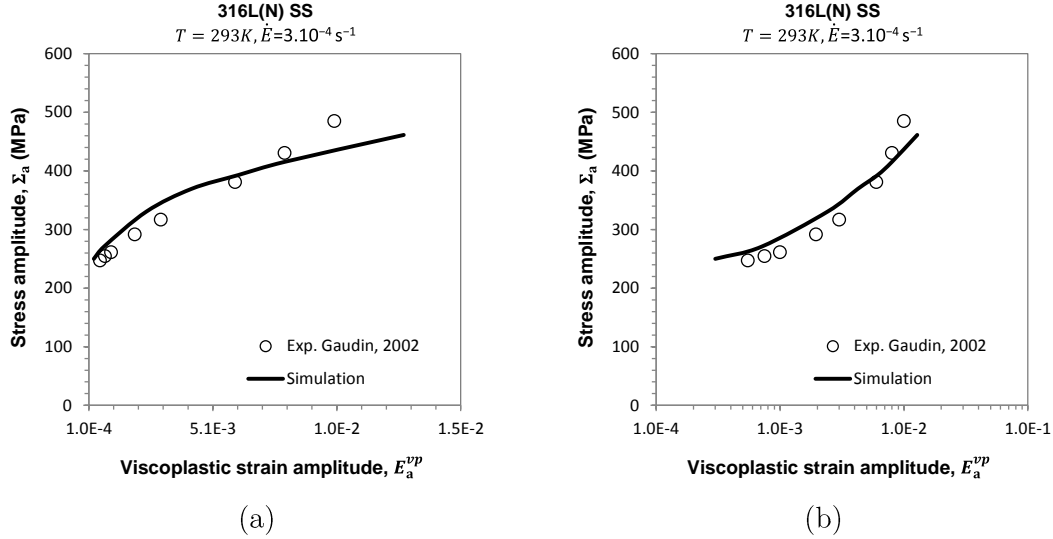


Figure 3.13 Comparison between the predicted and the experimental cyclic stress-strain curves. (a) Plotted in standard scale and (b) plotted in logarithm scale. 316L(N) SS (SQ sheet) at room temperature [18].

The hysteresis loops at saturation state for different strain amplitudes in the case of 316L SS [93] are shown in Figure 3.14. For the different strain levels, the hysteresis loops are also well described.

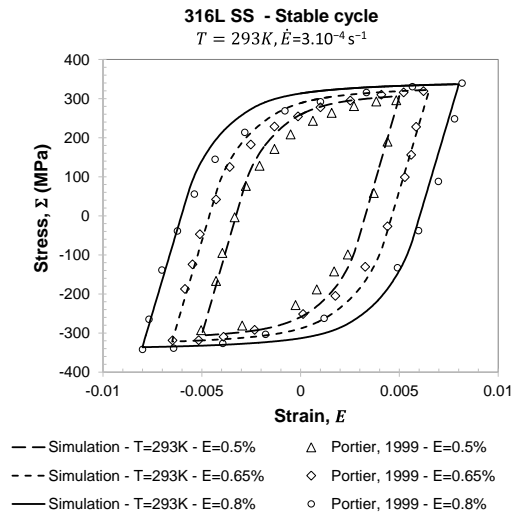


Figure 3.14 Hysteresis loops at saturation for different strain amplitudes ($E = \pm 0.5\%$; $E = \pm 0.65\%$; $E = \pm 0.8\%$). 316L SS at room temperature [93].

3.4.4 Ratcheting

As shown in Chapter 2, the Kröner-Secant tends to overestimate the ratcheting strain when compared to FE computations. Since the mean stress and stress amplitudes of most of experimental data published belongs to a domain for which the Kröner model rather

accurately describes the stress-strain loop and the axial strain evolution in comparison to the FE computation, this model predictions should also be considered in the case of non-zero mean stress cyclic loading. For this model, a new set of viscoplasticity parameters is identified using the same experimental tensile curves as in Section 3.2.4 (Figure 3.7). For 316L(N) SS, these adjusted parameters are $V = 96b^3$ and $Q = 1.55 e.V$, and for the set of 316L SS, $V = 136b^3$ and $Q = 1.6 e.V$. They are very close to the ones adjusted when using the Kröner-Secant approach.

The ratcheting strain is defined as the mean viscoplastic strain over each cycle, E_r^{vp} , or by the mean total strain over each cycle, E_r . A comparison between the ratcheting evolutions predicted by the Kröner-Secant and the Kröner models is shown in Figure 3.15, for a stress amplitude of $\Sigma_a = \pm 250 MPa$ and a mean stresses of $\Sigma_m = 50 MPa$. As showing in Chapter 2, the Kröner-Secant model largely overestimates the ratcheting strain, while the Kröner model results in a ratcheting strain evolution very similar to the experimental one.

If higher mean stresses or lower minimum compressive stress in absolute value are applied ($-150 MPa < \Sigma_{min} < 0 MPa$), the Kröner-Secant results in more accurate predictions in comparison to the FE computations. In order to compare the predictions of both models in this ratcheting loading domain, a ratcheting test was carried out at CEA under stress amplitude of $\Sigma_a = \pm 275 MPa$ and mean stress of $\Sigma_m = 125 MPa$. The ratcheting evolution predicted by the Kröner-Secant approach is closer to the experimental one than the Kröner one, after 100 cycles (Figure 3.16).

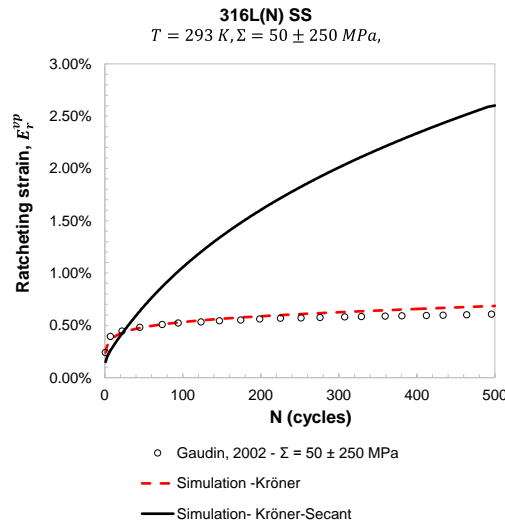


Figure 3.15 Ratcheting strain evolution predicted by the Kröner and the Kröner-Secant approaches. 316L(N) SS at room temperature, $\Sigma = 50 \pm 250 MPa$ [18].

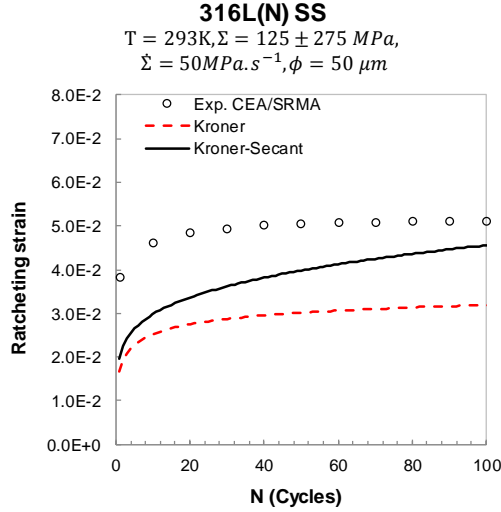


Figure 3.16 Ratcheting strain evolution predicted by the Kröner and the Kröner-Secant approaches. 316L(N) SS at room temperature, $\Sigma = 125 \pm 275 \text{ MPa}$.

In the following, we consider mainly low mean stresses loadings and only the Kröner model is applied to evaluate the ratcheting behavior. It must be pointed out that the calculated behavior under relaxation and cyclic loading using Kröner model are also in agreement with experimental data for 316L/316L(N) stainless steels at room temperature.

Figure 3.17a compares the calculated ratcheting evolution with the experimental data provided by Gaudin [18], for a mean stress, Σ_m , of 50 MPa and various maximum stresses, Σ_{max} . The comparisons between the predicted and the experimental curves for a higher mean stress of 125 MPa, provided by Yu et al. [97,246] are shown in Figure 3.17b. Whatever the mean stress, the ratcheting strain is well predicted.

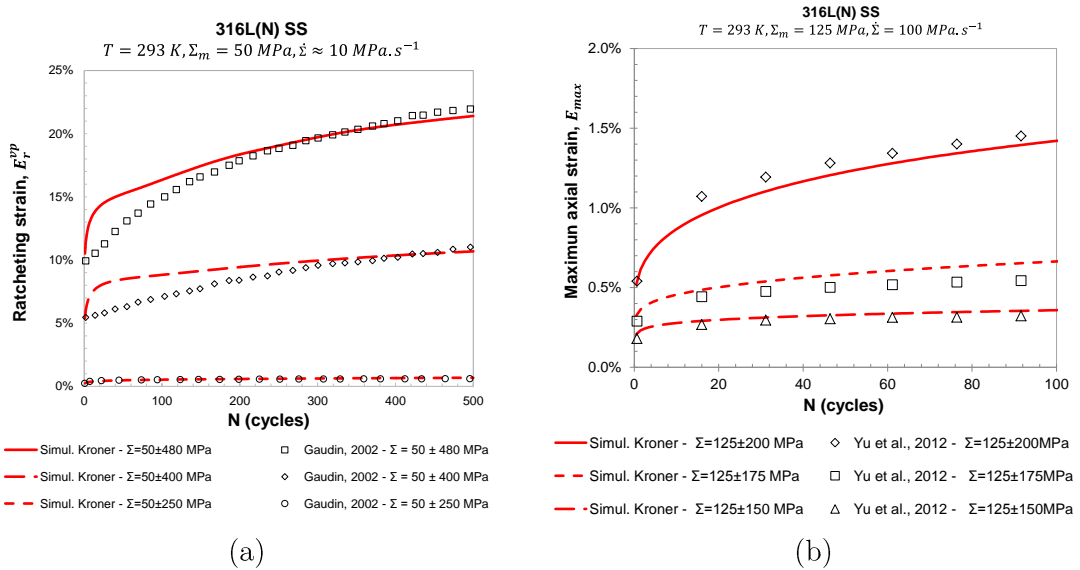


Figure 3.17. Ratcheting strain evolution for 316L(N) SS at room temperature. (a) $\Sigma_m = 50 \text{ MPa}$ and various maximum stresses [18] (b) $\Sigma_m = 125 \text{ MPa}$ and various maximum stresses [97,246].

The comparison between the calculated ratcheting evolution and the experimental one is also made for maximum stresses of 350 MPa (Figure 3.18a) and 450 MPa (Figure 3.18b) with various mean stresses. The model predicts fairly well the ratcheting behavior of 316L(N) SS at room temperature up to a maximum stress of 450 MPa and a viscoplastic strain of 10%, as no ratcheting curve is used in the identification of the viscosity parameters.

Figure 3.19 compare the evolution of the different populations of dislocation density and the ratcheting strain rate, for $\Sigma = 50 \pm 250 \text{ MPa}$ at room temperature. As one can observe, the ratcheting strain rate decreases by increasing the edge-dipole density. This behavior is in agreement with the observation of some authors [90,146,148], showing that the ratcheting strain rate decreasing is related to the appearance of dipolar structures in the material.

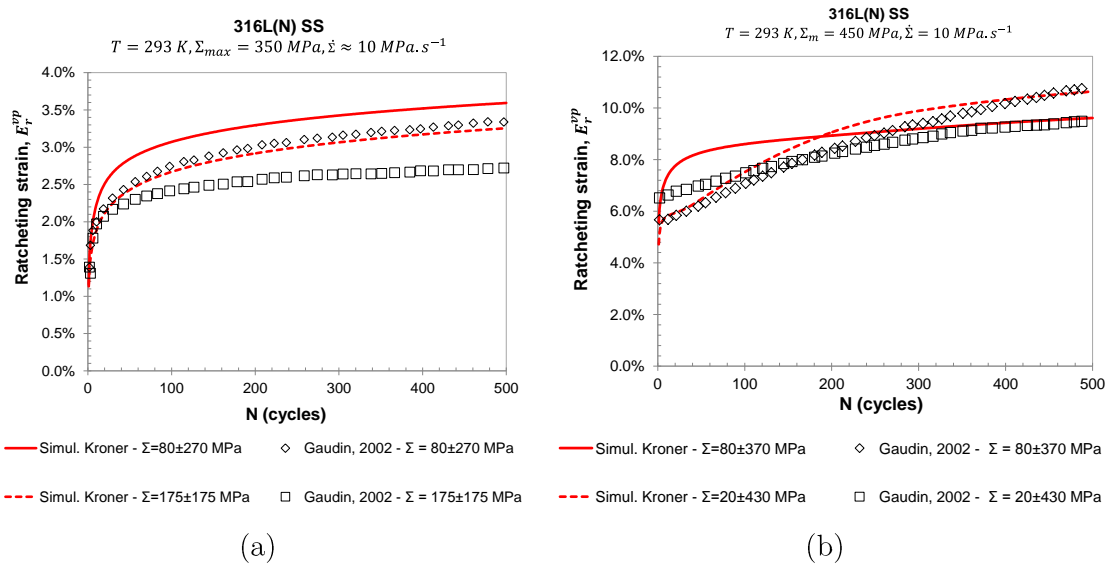


Figure 3.18 Ratcheting strain evolution for 316L(N) SS at room temperature. (a) $\Sigma_{max} = 350 \text{ MPa}$ and (b) $\Sigma_{max} = 450 \text{ MPa}$, various maximum stresses [18].

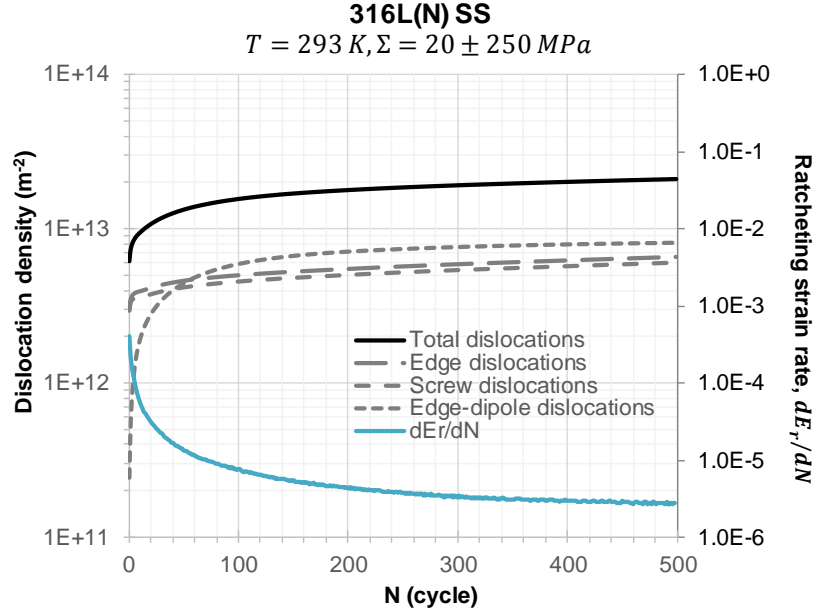


Figure 3.19 Comparison between the dislocation densities and the ratcheting strain rate evolution, during ratcheting test, $\Sigma = 50 \pm 250\text{ MPa}$, at room temperature

Figure 3.20 presents the effect of the stress rate on the evolution of the maximum axial strain. As observed experimentally for 316L(N) SS and 304L SS, the ratcheting strain decreases when the stress rate increases [95–97,248]. The model reproduces well the stress rate effect on the ratcheting strain, confirming the ability of the proposed model to account for the rate-deformation sensitivity of the material at the polycrystalline scale.

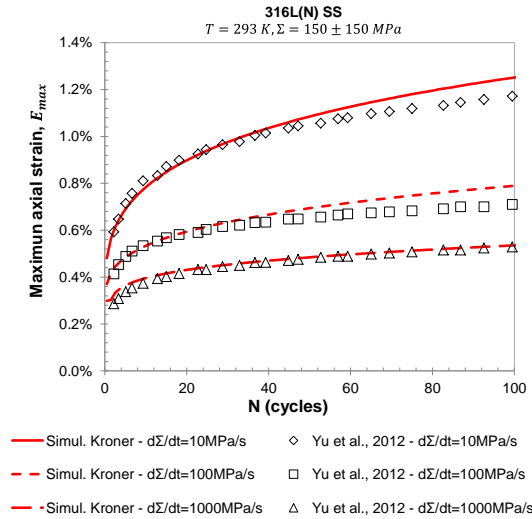


Figure 3.20. Evolution of the maximum axial strain evolution for 316L(N) SS at room temperature. Same applied maximum and minimum stresses, but with different stress rates [97,246].

Ratcheting tests carried out at various stresses levels reveal a significant effect of loading history on the ratcheting behavior of the 316L(N) stainless steel. Gaudin [18] showed that in the case of decreasing stress levels, the ratcheting strain remains almost stable. In the case of a test with ascending steps of stress, the strain increases strongly after each change

in the stress levels. Figure 3.21 compares the simulated curves and the experimental data for three loading stages. It can be inferred that the model is able to simulate the loading history effect, for either increasing or decreasing of the stress level. Nevertheless, the ratcheting strain is overestimated for the most severe loading conditions, $\Sigma=225\pm 225$ MPa.

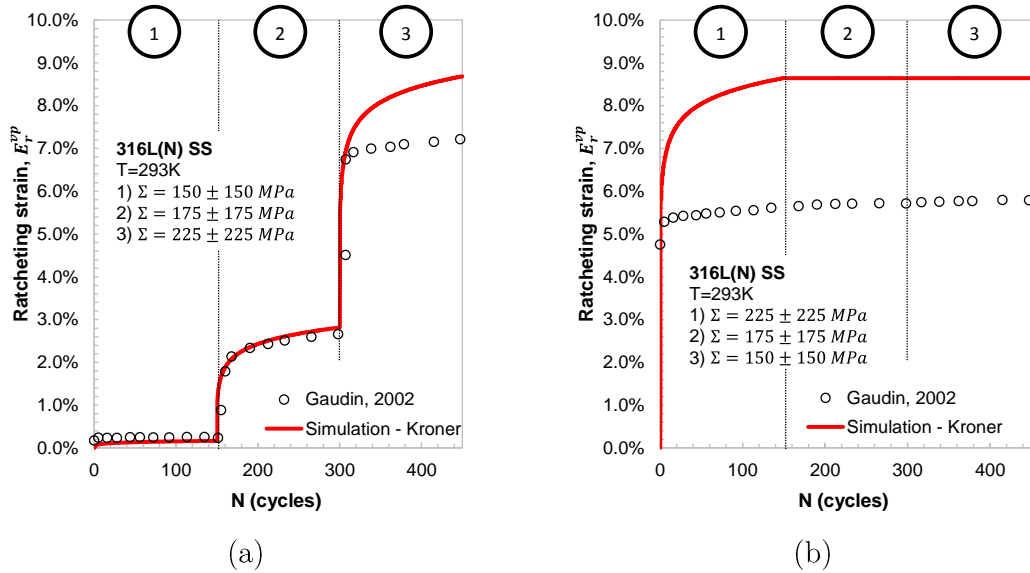


Figure 3.21. Ratcheting strain simulated by (a) increasing and (b) decreasing the stress level for the 316L(N) SS at room temperature. Experimental data take from [18].

Portier [93] performed ratcheting tests on 316L SS at low stress rate and different temperatures. The simulation results in a reasonable prediction of the ratcheting strain evolution compared to the experimental data. The behavior is better predicted at room temperature (Figure 3.22a) than at 423K (Figure 3.22b), wherein the ratcheting strain rate is overestimated.

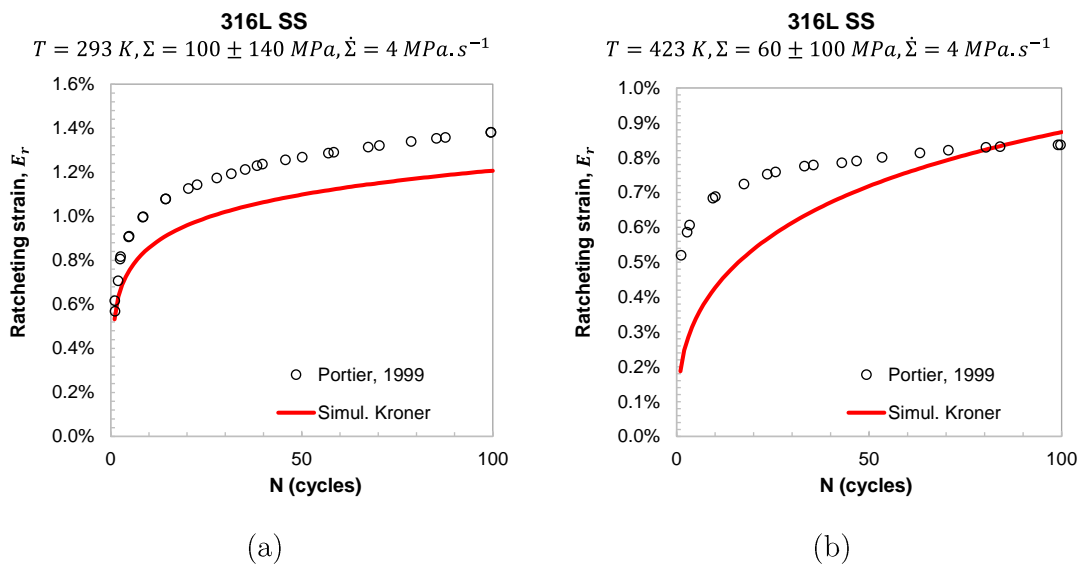


Figure 3.22. Ratcheting strain evolution for 316L SS: (a) at room temperature, $\Sigma = 100 \pm 140$ MPa; (b) at 423K, $\Sigma = 60 \pm 100$ MPa [93].

3.4.5 Sensitivity analysis with respect to material parameters

Most of the parameter values used in the model is provided by experimental measurements or by discrete dislocation dynamic calculations. In order to evaluate the robustness of the proposed model, the sensitivity of the predictions with respect to the parameters values is now assessed. The effect of different parameters on the predicted mechanical behavior is analyzed under tensile loading ($\dot{E} = 3.10^{-4} s^{-1}$), cyclic deformation ($E = \pm 0.6\%$; $\dot{E} = 3.10^{-4} s^{-1}$) and ratcheting ($\Sigma = 50 \pm 250 MPa$; $\dot{E} = 3.10^{-4} s^{-1}$). Only the predictions using the Kröner model are considered in the following. Table 3.5 summarizes the variation range of each material parameter, based on the way it is obtained.

Table 3.5 Range of variation of each material parameter and the range of variation on the computed macroscopic behavior

	Tensile stress ($E = 3\%$)	Cyclic amplitude ($N=200$)	stress	Ratcheting strain ($N=500$)
$\rho_0 \rightarrow (10^9 ; 10^{11}) m^{-2}$	-0.03% ; 0.16%	-0.01% ; 0.22%		-0.46% ; 0.39%
$y_e \rightarrow (0.6 ; 1.8) nm$	0.11% ; -0.21%	4.51% ; -4.37%		-4.41% ; 10.53%
$y_s \rightarrow (7.5 ; 22.5) nm$	0.19% ; -0.11%	10.79% ; -1.18%		-7.50% ; 0.94%
$K_{single} \rightarrow (200 ; 600)$	+0.00% ; -0.00%	0.35% ; -0.10%		-0.07% ; 0.06%
$K_{multi} \rightarrow (12.5 ; 37.5)$	8.79% ; -3.08%	3.89% ; -1.68%		-15.06% ; 7.50%

3.4.5.1 Initial dislocation density

The value of the initial dislocation density in the annealed state was measured 316L(N) SS (SQ sheet) by Gaudin [18] ($\rho_0=10^{10} m^{-2}$). However, the initial dislocation density may achieve higher values, as for the AVESTA sheet, which $\rho_0 \sim 3 \cdot 10^{12} m^{-2}$ [3,249]. Figure 3.23 presents the effect of the initial dislocation density on the macroscopic tensile curves. The corresponding experimental data are plotted for comparison.

The tensile curve is barely affected by an initial dislocation density value lower than $10^{12} m^{-2}$. The use of an initial dislocation density of $10^{13} m^{-2}$ induces a small shift in the tensile curve. This may correspond to one of the ways to induce a pre-hardening. Likewise, the cyclic hardening and the ratcheting behavior are slightly affected by initial dislocation densities lower than $10^{12} m^{-2}$. However, if a higher initial dislocation density value is used, the predicted ratcheting strain evolution is strongly affected, resulting in much lower ratcheting strain. But once more this would correspond to a cold-worked material and not like an annealed one, as the most of the stainless steels considered here.

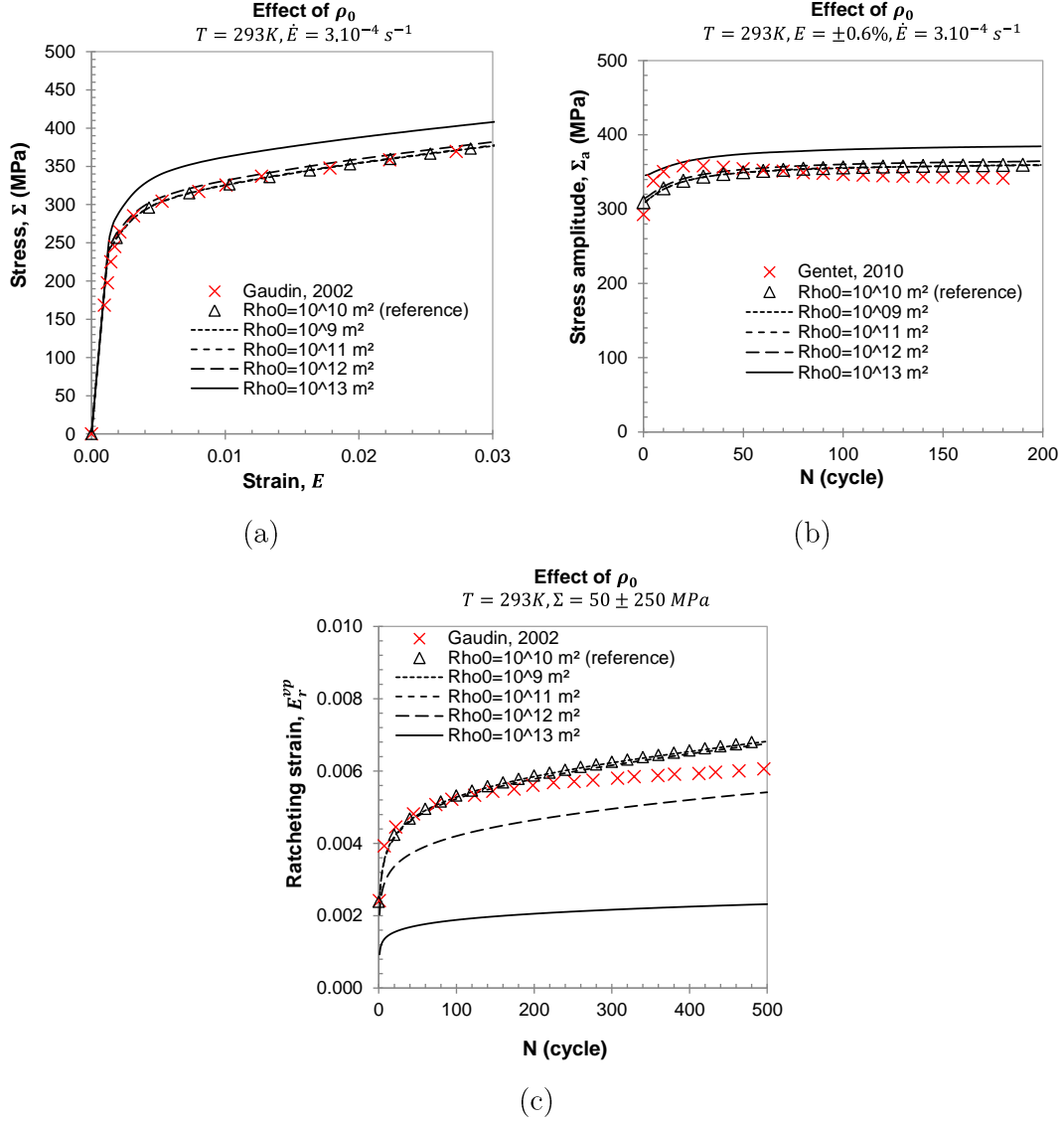


Figure 3.23 Effect of the initial dislocation density on the predicted curves obtained for (a) tensile, (b) fatigue and (c) ratcheting loadings. Reference value measured by [18].

3.4.5.2 Critical dislocation annihilation distances

Experimental measurements of the critical annihilation distance for edge and screw dislocations are difficult to carry out since a very high resolution of the microscopy equipment is required [229]. Even though, the values measured by TEM by Feaugas and coworkers [35,216] are used in the model instead of calculated values based on theories. Figure 3.24 compares the effect of both edge and screw critical annihilation distance parameters on the predicted cyclic hardening and ratcheting strain evolution.

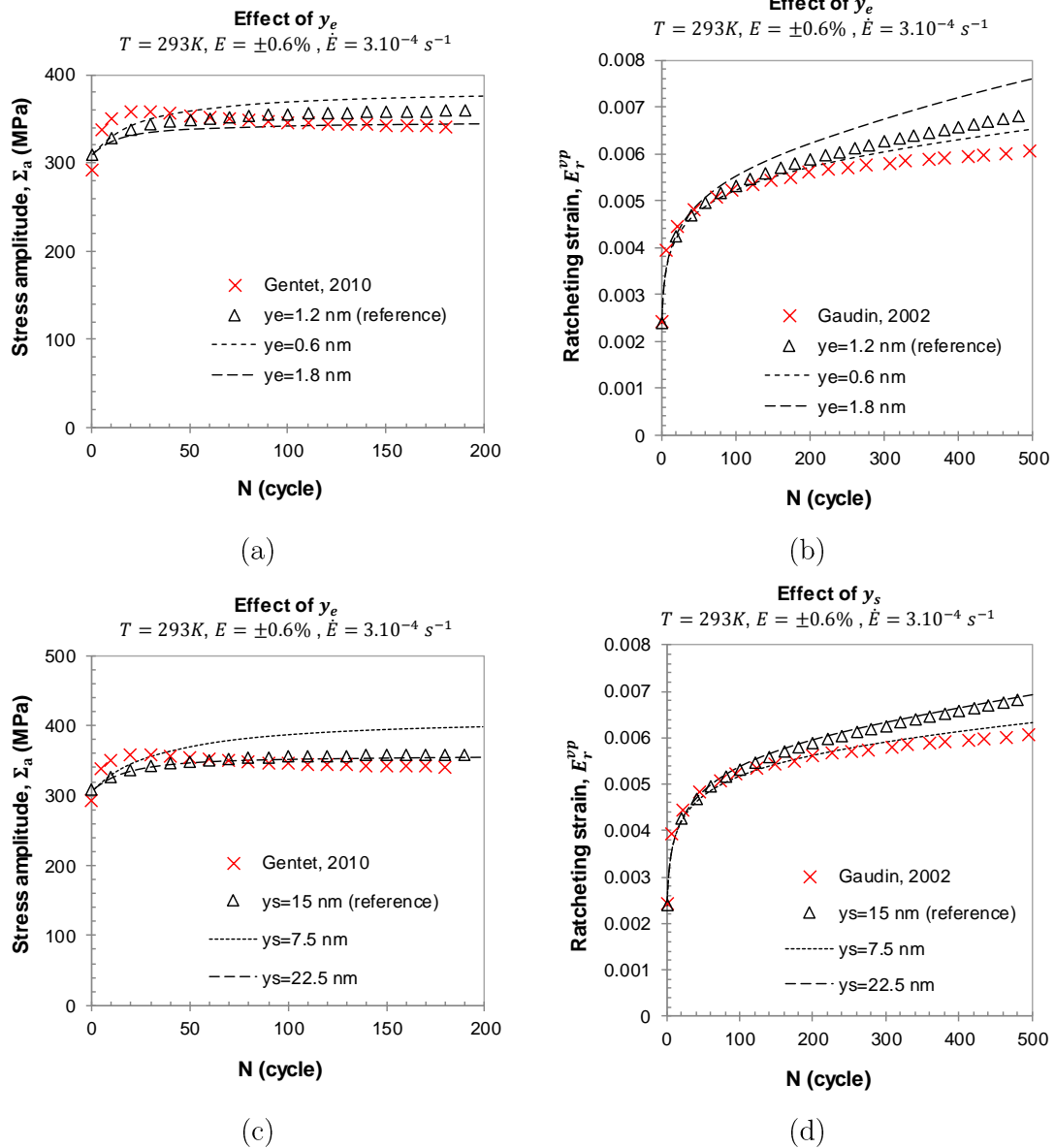


Figure 3.24 Effect of the critical dislocation annihilation distances on the predicted cyclic behavior. For the edge annihilation distance, y_e : (a) cyclic deformation and (b) ratcheting simulations. For the screw annihilation distance, y_s : (c) cyclic deformation and (d) ratcheting simulations. Reference values measured by TEM [35,216]

When the critical annihilation distances increase, the probability of annihilating opposite sign parallel dislocations also increases. By consequence, lower cyclic hardening and higher ratcheting strain are expected, since the total dislocation density decreases.

In Section 3.2.2.2, experimental and theoretical values of the critical annihilation distance of edge and screw dislocations were suggested. In the case of edge dislocations, molecular dynamics calculations indicates values of critical annihilation distance between $1.5b$ and $2.5b$ [239,240]. Comparing the reference curves computed using experimental values ($y_e^{exp} = 1.2nm$ and $y_s^{exp} = 15nm$) [216,35], with the ones computed using the calculated values a relatively small difference is observed (Figure 3.24), showing the robustness of the predictions with respect to these parameters.

3.4.5.3 Mean free-path parameters

The mean free-path parameters, κ_{single} and κ_{multi} , used in the model are determined from experimental tensile curves of single crystals (Figure 3.5). Figure 3.25 and Figure 3.26 allow the assessment of the effect of both parameters on the predicted polycrystal behavior.

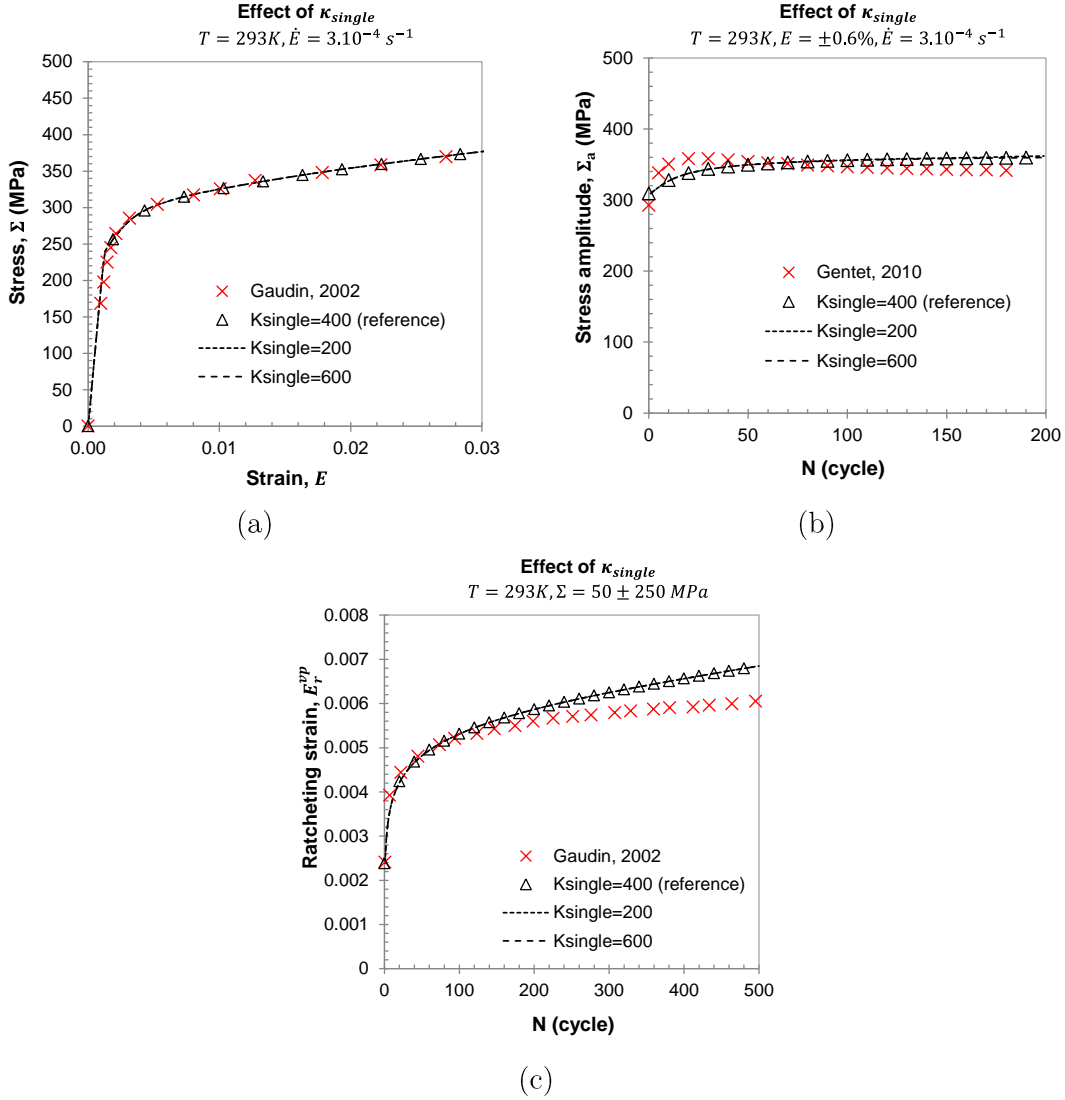


Figure 3.25 Effect of the mean-free path parameter of well-oriented crystals (κ_{single}) on the predicted mechanical behavior under: (a) tensile, (b) cyclic deformation and (c) ratcheting loadings.

In the case of crystals oriented for single slip, the dislocation density is low, and the value of κ_{single} is high. This results in a large mean free-path. Dividing or multiplying this value by a factor two do not change the predicted polycrystal curves (Figure 3.25). Crystals oriented for multiple slip are characterized by a larger number of forest obstacles, and the value of κ_{multi} is low, resulting in a small mean free-path. The overall response of the polycrystal is more sensitive to this parameter (Figure 3.26). By changing the value of κ_{multi} by $\pm 50\%$ the tensile curve is affected by -3% and 9% respectively, at a remote strain

$E = 3\%$. The stress level during the cyclic hardening and the ratcheting strain evolution are also affected by the value of κ_{multi} .

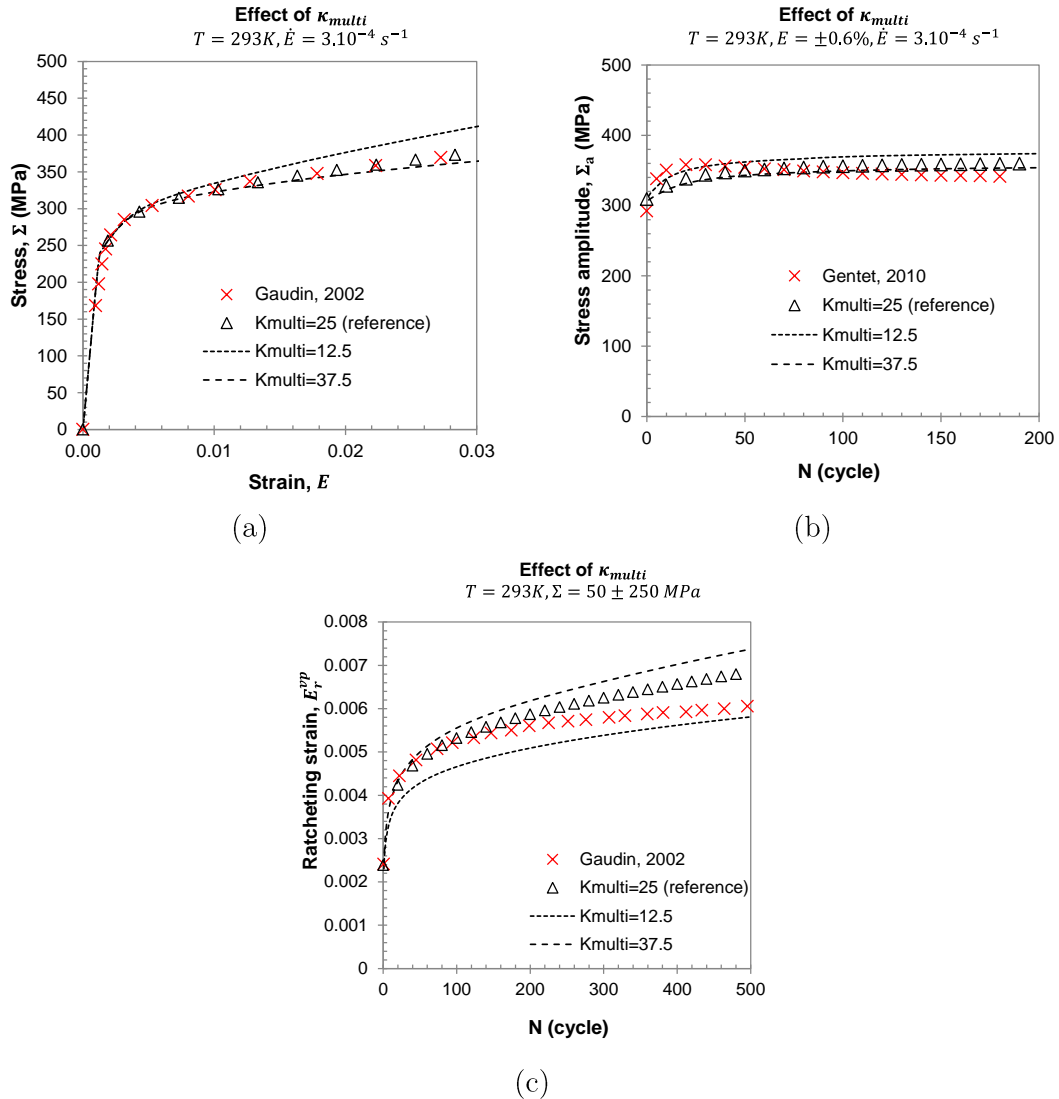


Figure 3.26 Effect of the mean-free path parameter of crystals oriented in multiple slip, κ_{multi} , on the predicted curves under: (a) tensile, (b) cyclic deformation and (c) ratcheting loadings.

Since this parameter affects the polycrystal behavior, the partition of the crystals in multiple or single slip, controlled by the critical value R_{crit} , is also influent. Table 3.6 shows the fraction of crystals (in %) supposed to be oriented for single or multiple slip as a function of R_{crit} . The critical value R_{crit} is influent on the polycrystal behavior, since it results in a significant change in the fractions of crystals oriented for multiple slip. The choice of lower values of R_{crit} result in a higher hardening under tensile loading, since the crystals oriented for multiple slip are more numerous (Figure 3.27a). By consequence, higher stress amplitude is observed under cyclic deformation loading (Figure 3.27b) and lower viscoplastic strain under ratcheting loading (Figure 3.27c).

Table 3.6 Percentage of crystals located in the central part and in the periphery area of the standard triangle (ST).

R_{crit}	Fraction of crystals located in the central part of the ST, oriented for single slip	Fraction of crystals located in the periphery of the ST, oriented for multiple slip
0.72	0%	100%
0.82	14%	86%
0.90	34%	66%
0.93	48%	52%
0.95	61%	39%
0.97	74%	26%
0.99	87%	13%
1.00	100%	0%

Values calculated considering 100 random crystal orientations

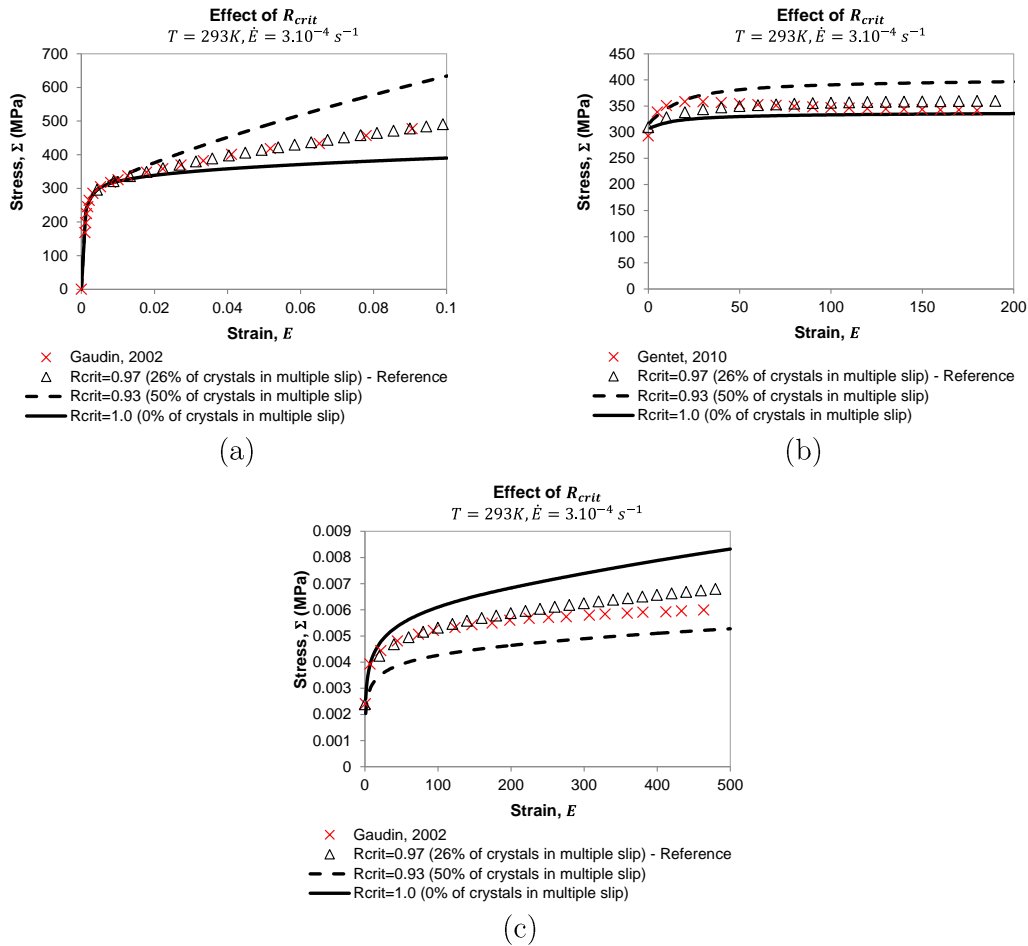


Figure 3.27 Effect of the critical ratio (R_{crit}) on the mechanical behavior under: (a) tensile, (b) cyclic deformation and (c) ratcheting loadings.

Observing the surface of a polycrystalline 316L(N) SS ($\phi \sim 90 \mu m$), Hazan measured about 68% of the grains under single slip at high remote viscoplastic strain ($E^{vp} = 15\%$). Man et al. [139] found that about 70% of the grains are subjected to single slip after cyclic deformation in a 316L SS ($\phi = 39 \mu m$) at RT ($E_a^{vp} = 0.1\%$). Similar observations were done

by Cailletaud et al. [211]. The choice of $R_{crit}=0.97$ is therefore reasonable, since the percentage of crystals in the central part of the ST is both in agreement with surface observations [139,211] and with TEM observations made by Gaudin [18] (Figure 3.6).

3.5 Discussion

Based on the physical mechanisms, a dislocation-based viscoplastic model is proposed with only two material parameters to be adjusted. The viscosity parameters are the only parameters identified by inverse procedure, using experimental macroscopic tensile curves at different strain rates and temperatures. All the other input parameters were determined using single crystal experimental data (tensile curves), experimental measurements (TEM) or values provided by discrete dislocation dynamics. The model results in fairly reliable predictions of the cyclic behavior for the two considered sets of austenitic stainless steels (316L and 316L(N)). Despite these promising results, some issues are discussed in the following subsections and our predictions are then compared with the ones provided by other polycrystalline models.

3.5.1 Cyclic hardening/softening behavior

Depending on test conditions, the austenitic 316L/316L(N) SS may exhibit cyclic softening, after a cyclic hardening phase [41,64,130,132,133,250]. Usually, the hardening stage represents a relatively small fraction of fatigue life and can be explained by a strong increase in dislocation density. According to Pham et al. [134], after achieving a maximum value, the dislocation density remains almost constant until the end of the fatigue life. The dislocation density stability is dependent on the equilibrium between the mechanisms of multiplication and annihilation.

Different theories are proposed in order to explain cyclic softening. This phenomenon is mainly attributed to three factors [41,107,133,134]: dislocation starvation, presence of solute atoms increasing the short-range order (SRO) and the rearrangement of dislocation structures. First, the dislocation starvation may affect plasticity if it is more difficult to generate dislocations than to make existing dislocations glide [107]. As a consequence, the flow stress would gradually decrease when more and more dislocations become available to accommodate the applied strain. Second, this mechanism would be favored by the presence of solute atoms (higher SRO), which would increase the stress required to produce new dislocations [107,133]. Third, the arrangement of dislocations into more complex dislocation structures would make more favorable the movement of the dislocations in the areas characterized by low dislocation densities, resulting in the decrease of the flow stress [133,134]. Analysis of stress-strain curve of polycrystalline 316L(N) SS suggest that the cyclic softening results in a reduction of both short and long-range internal stresses [146].

The proposed model describes fairly well the cyclic hardening stage, wherein the dislocation density increases, tending to stabilization after some cycles (Figure 3.12). Nevertheless, cyclic softening is not predicted by the proposed model. Experimental observations [134,146] indicate that the description of this mechanism would involve the evolution of the intragranular stresses. The description of dislocation microstructures evolution during the post peak behavior may allows us to predict the observed softening.

3.5.2 Robustness of the proposed model

The sensitivity analysis showed that the predictions are dependent on the free mean-path of multiple slip-oriented crystals (κ_{multi}) and, by consequence, the R_{crit} parameter. Since these parameters were determined using experimental data of single crystals and MET observations, some deviations are expected in the polycrystal. The R_{crit} value, considered as a constant in the model, might also change as a function of the viscoplastic strain, the number of cycles and temperature.

As mentioned previously, an additive law describing the dislocation storage rate term by the sum of different contributions, the self-interaction, the forest interactions (Hirth, Lomer and glissile) and the coplanar interaction, was proposed by Kubin et al. [10]. The mean free-path equation is described as dependent on the crystal orientation in the case of tension or compression and, by consequence, the number of active slip systems. The utilization of such a kind of law would result in straightforward partitioning of the standard triangle, since the viscoplastic behavior of each crystal would be related to its crystalline orientation. The introduction of this type of constitutive law is presented in next chapter (Section 4.2).

3.5.3 Comparison with the prediction of other polycrystal models

Comparing with the dislocation density-based viscoplastic polycrystalline models proposed by Gaudin [18] and Dong et al. [209], the number of adjustable parameters of the proposed model is much lower (Table 3.7). In this work, only the two parameters related to the thermal activation of dislocation glide are adjusted using polycrystal tensile curves of 316L/316L(N) SS.

Table 3.7 Adjustable parameters and experimental curves used on the adjustment process of the proposed model and different other dislocation density-based viscoplastic polycrystalline models

Adjustable parameters	Adjustment method
-----------------------	-------------------

Present work	<ul style="list-style-type: none"> • Viscoplasticity parameters: V, Q 	Tensile curves at different strain rates and temperatures
Dong et al. [209]	<ul style="list-style-type: none"> • Intragranular kinematic hardening rule parameters: $g, h_0, h_{\text{sat}}, \rho_c^\alpha$ • Viscoplasticity coefficient: n • Scale-transition rule parameters: C, D 	Tensile curve at $\dot{E} = 2.10^{-3} \text{s}^{-1}$
Gaudin [18]	<ul style="list-style-type: none"> • Hardening coefficient: α • Dislocation evolution rule coefficients: β_ϕ, β_θ • Scale-transition rule parameters: δ, D, D' 	Loading-unloading test (first half-cycle) $\dot{E} = 3.10^{-4} \text{s}^{-1}$

According to Dong et al. [209], only a tensile experimental curve ($\dot{E} = 2.10^{-3} \text{s}^{-1}$) was used to adjust the seven parameters of their model. That statement seems surprising, since we can expect to find many 7-uplets of input material parameters allowing these authors to predict well the tensile curve. Dong et al. [209] considered only the edge dislocation density, not accounting for the production of dipoles in their model. Nevertheless, they accounted for the mean grain size on it, by applying the additive equation proposed by Estrin and Mecking [234] (Equation 3.8). Figure 3.28 compares the evolution of stress amplitude and the first stress-strain loop predicted by the proposed model and by Dong's model to the experimental data.

Both models result in good predictions of the cyclic behavior. However, Dong's model allows a more accurate prediction of the cyclic stress evolution (Figure 3.28a). For both models, one can observe a difference between the experimental and the calculated loading/unloading yield strength (Figure 3.28b), linked to an overestimation of the isotropic stress. The model proposed by Dong and coworkers results in good predictions of ratcheting behavior in the case of high stress amplitude (Figure 3.29a). But the prediction of our model is in better agreement with the experimental curve in the case of lower stress amplitude (Figure 3.29b).

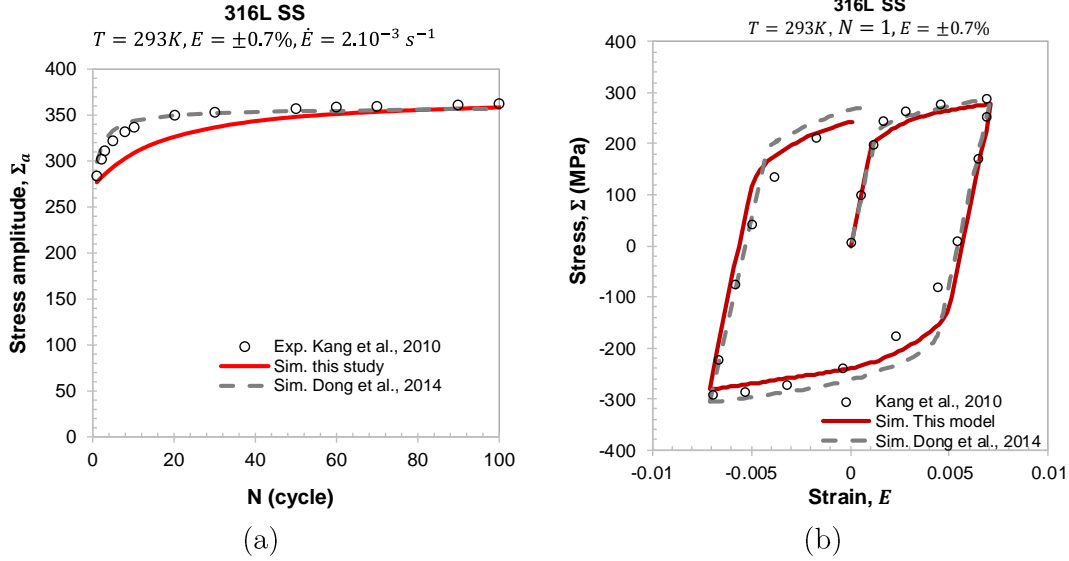


Figure 3.28 Comparison between the simulation of the results provided by the present model (using the Kröner approach) and the ones proposed by Dong et al. [209]. 316L SS, $E = \pm 0.7\%$ and $\dot{E} = 2.10^{-3} s^{-1}$ at RT: (a) stress amplitude evolution with the number of cycles and (b) first stress-strain loop.

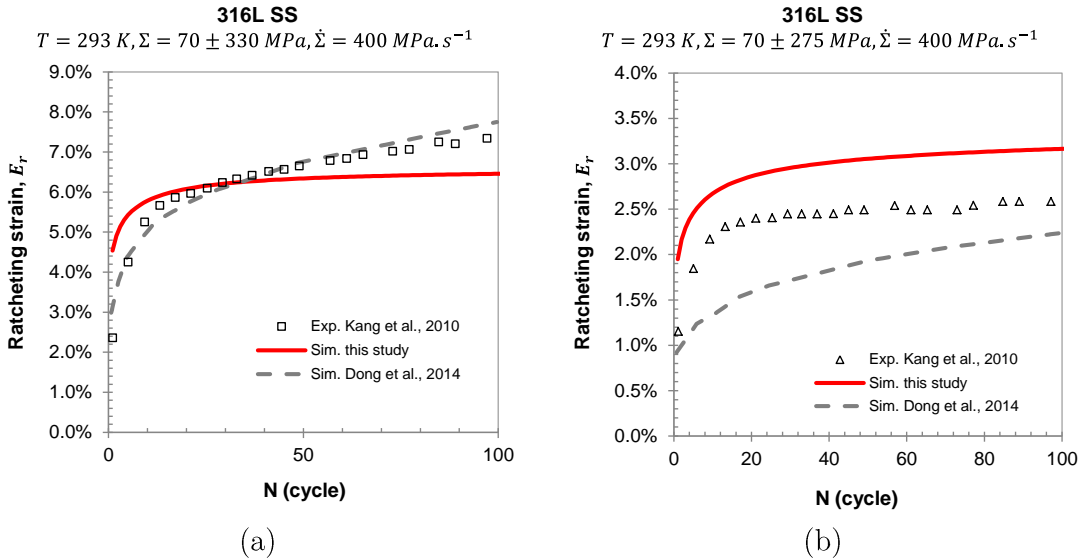


Figure 3.29 Comparison between the ratcheting curves provided by the present model (using the Kröner approach) and the ones proposed by Dong et al. [209]. 316L SS, ratcheting strain evolution at RT: (a) $\Sigma = 70 \pm 330 MPa$ and (b) $\Sigma = 70 \pm 275 MPa$ [89].

Gaudin [18] used a loading-unloading test (first half-cycle curve) to adjust the six material parameters of his polycrystalline model. Instead of adjusting the viscoplasticity parameters using polycrystalline curves, Gaudin used the activation volume value related to cross-slip activation in FCC metals, based on the equation proposed by Escaig [251]. The activation energy is estimated from the relation $\tau_0 = Q/V$. The initial critical stress was determined from a tensile curve of a 316L(N) SS polycrystal, using the Taylor scale transition parameter ($M = 3.06$). Gaudin considers the evolution of a dislocation microstructure, composed by channels and walls, based on the composite model proposed by Mughrabi [108]. On the one hand Gaudin accounted of the production/annihilation of dipoles in his

model, on the other hand only the edge dislocations were considered as mobile dislocations, and no screw dislocations were introduced.

Figure 3.30 shows the experimental evolution of the stabilized ratcheting rate, dE_r^{vp}/dt , as a function of the maximum applied stress, Σ_{max} , for a constant mean stress of 50 MPa (Figure 3.30a), and as a function of the mean stress, Σ_m , for a constant maximum stress of 350 MPa (Figure 3.30b). The predictions of our model and those of Gaudin one are plotted, for comparison. Both models lead to a good agreement with the corresponding measured stabilized ratcheting rate. A better agreement with experimental data is found in the case of low maximum stresses ($\Sigma_{max} < 350$ MPa, Figure 3.30a). For maximum stresses higher than 350 MPa, Gaudin's model tends to overestimate the ratcheting strain rate, while our model underestimates it. For a constant maximum stress of 350 MPa (Figure 3.30b), both models result in very similar predictions.

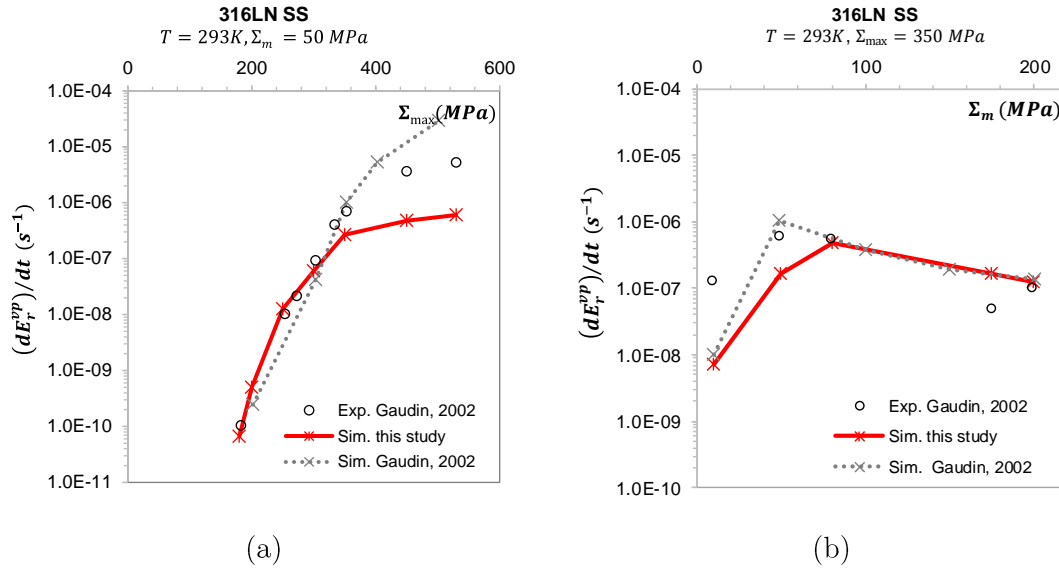


Figure 3.30 Comparison between the simulation provided by our model (using the Kröner approach) and Gaudin one [18] 316L(N) SS at RT: stabilized ratcheting strain rate in function of the (a) maximum applied stress and (b) the mean stress.

The models proposed by Dong and Gaudin provide fairly reliable predictions of the cyclic behavior. However, these models require the adjustment of many more parameters than our one, using experimental cyclic curves in the inverse identification process, as in the case of Gaudin's one. Furthermore, the adjustment of the two viscosity parameters proposed in this work require the use of only tensile curves at different strain rates and temperatures, allowing to correctly account for the thermally-activated mechanisms acting on dislocation gliding. The computations based on our model results in a fairly good prediction of the tensile and cyclic behavior of 316L/316L(N) steel at room temperature, in a very large range of loading conditions.

3.5.4 Number of active slip systems

Even if the macroscopic predictions of the proposed model are in rather fair agreement with the experimental results, a question must be asked in order to obtain a more precise description of the viscoplastic deformation. Does the proposed model correctly predict the reduced number of active slip systems observed experimentally in the majority of the grains at high remote viscoplastic strain?

In fact, the utilization of these self-consistent models results in high internal stresses [157,164], favoring the activation of numerous slip systems, even at low remote viscoplastic strain (Figure 3.31). This behavior is not in agreement to the experimental observations carried on the surface of a polycrystalline 316L SS, in which about 68% of the grains are subjected to single slip at high remote viscoplastic strain ($E = 15\%$) [86].

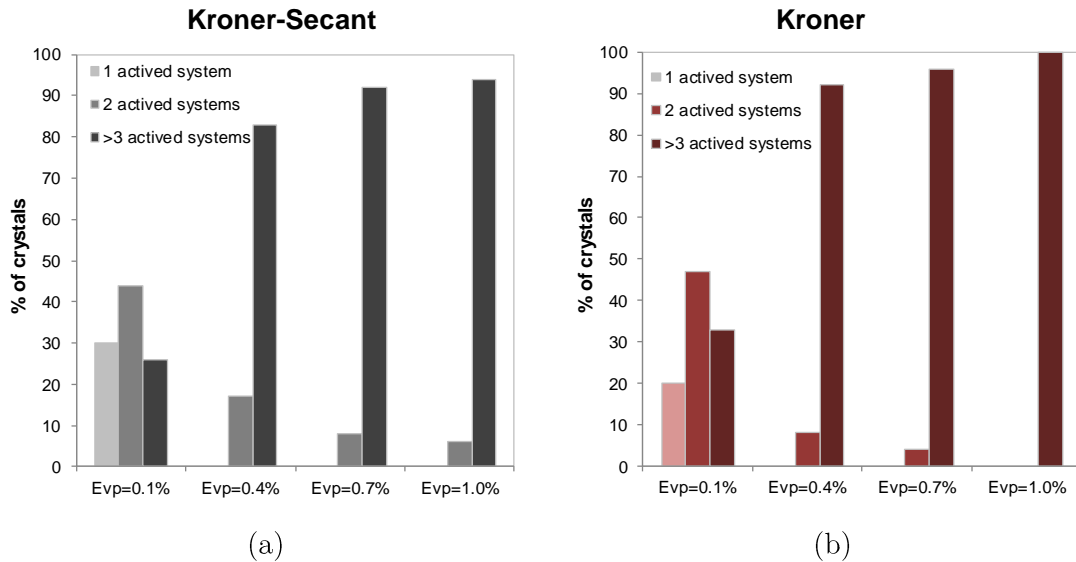


Figure 3.31 Number of active slip systems by grain for different remote viscoplastic strains, using the (a) Kroner-Secant and (b) Kroner models. A slip system, i , is assumed to be active when $|\gamma_i^{vp}| > 10^{-4}$.

In the next chapter, we propose new scale transition models, accounting for the localization of plastic deformation in thin slip bands. The internal stresses induced in the slip bands instead of in the grains are supposed to limit the number of active slip systems. Moreover, such kind of model may result in a more precise description of the stacking fault energy and the grain size effects in polycrystals behavior.

3.6 Conclusions

A dislocation-based viscoplastic model developed to predict the cyclic behavior of stainless steels at room temperature and slight above was presented. The proposed model is based on the physical mechanisms of viscoplastic deformation, with only two adjustable parameters (activation volume, V , and activation energy, Q). Experimental macroscopic

tensile curves, at different strain rates and temperatures, of 316L/316L(N) stainless steels were used to adjust these two viscoplasticity parameters by inverse identification.

At the grain scale, the constitutive laws describe the evolution of three populations of dislocation densities for each of the 12 FCC slip systems: edge, screw and edge-dipole dislocations. Only edge and screw dislocations carry the plastic slip; the dipoles dislocations are considered as immobile. The Kröner-Secant self-consistent localization rule was used to compute the polycrystal elastic-viscoplastic behavior. Since the use of this rule tends to largely overestimate the ratcheting strain comparing to FE computations in the experimental domain of interest, the Kröner approach was applied in the case of non-zero mean stress cyclic loading.

It is shown that the proposed model allows reliable predictions of the relaxation, cyclic deformation and ratcheting behavior. Compared with other dislocation-based viscoplastic models [18,209], with many more materials parameters to be identified all together, using macroscopic experimental data, the predictions of the proposed model are promising.

A sensitivity analysis of the parameters determined experimentally showed a fairly good robustness of the model. Even though, some improvements will be proposed in next chapter by replacing the mean free-path description based on the partition of the standard triangle by the additive approach proposed by Kubin et al. [10]. Additionally, the influence of the normalized stacking fault energy ($\gamma_{SFE}/\mu b$) and intragranular slip localization will be investigated.

4 Perfectionnement du modèle de comportement des polycristaux CFC à température ambiante

Dans ce chapitre, deux voies d'amélioration du modèle polycristallin à température ambiante sont proposées. La première voie vise à mieux décrire l'évolution de la densité de dislocations en fonction du type d'interaction entre les systèmes de glissement. La contribution de chaque type d'interaction sur la production des dislocations est prise en compte avec un modèle additif. Les paramètres liés à la production de dislocations sont identifiés pour différents métaux CFC (Al, Cu, Ni, Ag, CuZn et 316L(N)). Une comparaison entre les prédictions du comportement mécanique, obtenues avec le modèle additif et le modèle de partition du triangle standard, utilisé dans le chapitre 3, montre que cette amélioration permet une bonne description du comportement monotone et cyclique de l'acier 316L(N). Pour la deuxième voie, nous proposons des nouvelles lois d'homogénéisation, en prenant en compte les contraintes internes induites par les bandes de glissement observées à la surface des différents métaux CFC. Les caractéristiques des bandes de glissement dépendent fortement de l'énergie de faute d'empilement. Ces modèles permettent de mieux représenter l'activation des systèmes de glissement dans les polycristaux CFC et l'évolution du coefficient de Hall-Petch en fonction de l'énergie de faute d'empilement.

In this chapter, two methods are proposed to improve the polycrystalline model at room temperature. The first method is devoted to a better description of the dislocation density evolution, depending on the different interactions between the slip systems. The contribution of each type of interaction on the dislocations production is taking into account by an additive model. The parameters related to the dislocations production are identified for different FCC metals (Al, Cu, Ni, Ag, CuZn and 316L(N)). A comparison between the predictions of the mechanical behavior of 316L(N) SS, obtained using this additive model and the standard triangle partition one, used in Chapter 3, shows that this additive law allows a good description of monotonic and cyclic behavior. For the second part, one proposes a new homogenization model, accounting for the internal stresses induced in slip bands instead of in grains. The evolution of slip bands observed on the surface of the different FCC metals is considered in these approaches. The slip band features are strongly dependent on the stacking fault energy. These models result in a better representation of the activation of slip systems in the different FCC polycrystals and also of the evolution of the Hall-Petch coefficient as a function of the stack fault energy.

4.1 Introduction

Dans le Chapitre 3, un modèle micromécanique à l'échelle des densités des dislocations a été proposé pour prédire le comportement monotone et cyclique des polycristaux CFC dans un intervalle de température entre 293 K et 523 K. Ce modèle a permis de rendre compte des résultats expérimentaux de l'acier 316L/316L(N) en déformation cyclique et en déformation progressive, à différentes amplitudes de chargement.

Dans ce chapitre, nous proposons d'examiner certains points faibles du modèle dans sa version précédente. Notamment, quelques points seront abordés dans la suite :

- La dépendance du taux de production des dislocations en fonction de l'orientation cristalline et des types d'interaction entre les systèmes de glissement ;
- L'extension du modèle à des chargements multiaxiaux
- Le nombre de systèmes actifs observés pour les métaux CFC ;
- La prise en compte de l'énergie de faute d'empilement sur les prédictions du modèle, mais aussi la linéarité de la courbe de traction et la dépendance de la pente d'écrouissage par rapport à la taille de grain moyenne [252–254].

Un point faible du modèle présenté précédemment réside dans la partition des cristaux en deux familles en fonction de l'orientation cristalline. La première famille assemble les cristaux orientés préférentiellement pour le glissement multiple et la deuxième famille correspond aux cristaux dont l'orientation favorise le glissement simple, valable sur des essais de traction uniaxial. La partition théorique entre les deux familles est définie par une valeur critique du rapport R , entre la deuxième cission la plus élevée ($\tau_{secondary}$) et celle du système primaire ($\tau_{primary}$), en considérant les 12 systèmes de glissement faciles des structures CFC. La valeur critique du rapport R_{crit} est déterminée à partir d'observations en microscopie électronique de transmission (MET). Pour l'acier 316L(N) à température ambiante en traction, la valeur critique du rapport a été déterminée comme étant de $R_{crit} = 0,97$ (voir Figure 3.6 , Chapitre 3). Avec cette valeur de R_{crit} , 74% des grains sont considérés en glissement simple. Ce résultat est validé par les mesures expérimentales faites par Hazan [86], sous un chargement monotone en traction jusqu'à $E = 17\%$, et Man et al. [139] et Cailletaud et al. [211], pour des chargements cycliques. Toutefois, comme il a été discuté dans le chapitre précédent, la réponse du modèle est sensible à l'incertitude sur ce paramètre.

Un autre point à améliorer concerne le nombre de systèmes de glissement activés lors de la déformation plastique. En effet, les modèles à champs-moyens et en champs-complets appliqués dans les chapitres précédents aboutissent à une contradiction sur le nombre de

systèmes activés par grain (Figure 4.1) puisque, dans la plupart des cas, plusieurs systèmes de glissement sont activés dans la majorité des grains, même dans ceux considérés en glissement simple. L'activation de nombreux systèmes est observée dans le cas des modèles plutôt rigides, comme celui de Kröner [157,255], mais aussi dans le cas des modèles dont les contraintes internes sont considérées comme faibles, tels que le modèle de Molinari dans sa version tangent [164]. Dans le cas du modèle Kröner-Secant comme dans le cas des calculs par éléments-finis en champs-complets, une rapide activation de plusieurs systèmes par grain est également observée (Figure 4.1) pour une déformation viscoplastique faible, $E^{vp} < 1\%$.

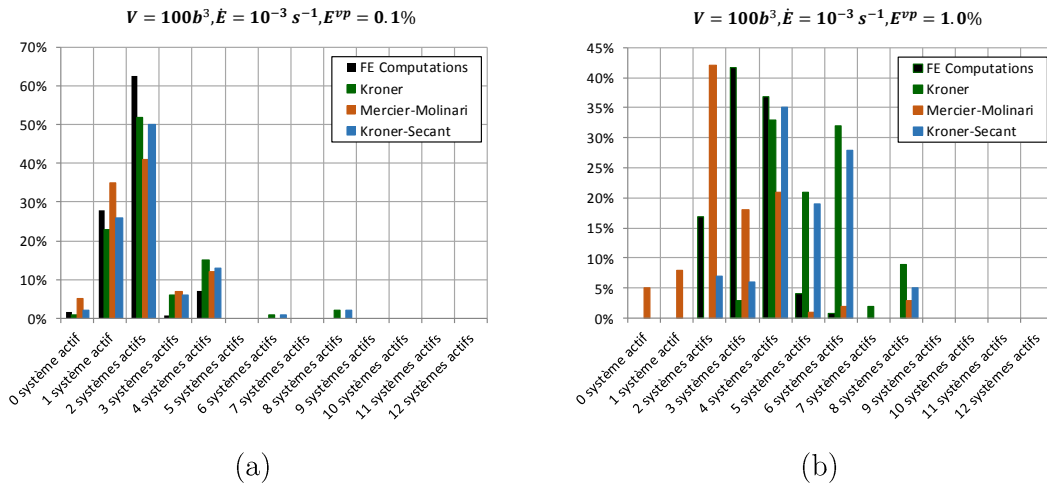


Figure 4.1 Nombre de systèmes activés par grain. Comparaison des différents modèles auto-cohérents et la méthode des EFs. (a) $E^{vp} = 0.1\%$ et (b) $E^{vp} = 1\%$. Un système, i , est considéré actif lorsque $|\gamma_i^{vp}| > 10^{-4}$.

« Number of active slip systems by grain for the different self-consistent models and the finite-element method: (a) $E^{vp} = 0.1\%$ et (b) $E^{vp} = 1\%$. A slip system, i , is assumed to be active when $|\gamma_i^{vp}| > 10^{-4}$. »

Il est attendu que l'activation des systèmes de glissement secondaires soit plus rapide dans les métaux à plus grande valeur de $\gamma_{SFE}/\mu b$. Comme il a été montré dans le Chapitre 1, l'énergie de faute d'empilement des métaux et alliages CFC joue un rôle important dans les mécanismes de glissement [45]. Ces modèles proposés permettent-ils de rendre compte de cette influence?

Dans le cas des polycristaux, la taille de grain agit aussi sur les propriétés mécaniques : plus les grains sont petits, plus il y a d'obstacles pour ancrer les dislocations en glissement [256]. La relation de Hall-Petch [257,258] définit que la limite d'élasticité conventionnelle, $\Sigma_{0.2\%}$, varie de manière proportionnelle à l'inverse de la racine de la taille moyenne des grains :

$$\Sigma_{0.2\%} = \Sigma_f + K_{HP}/\sqrt{\phi} \quad \text{Équation 4.1}$$

Où Σ_f désigne la contrainte de friction caractéristique de chaque matériau, exprimée en terme de contrainte de traction, et K_{HP} est la constante de Hall-Petch ($MPa\sqrt{m}$).

Plusieurs auteurs [252,253,259–262] ont étudié l'effet de l'énergie de faute d'empilement sur l'effet Hall-Petch des matériaux CFC. Ces études montrent que la constante de Hall-Petch est plus élevée pour les matériaux à plus faible valeur de $\gamma_{SFE}/\mu b$. Il est montré que l'effet de la taille de grain sur la déformation plastique dépend du caractère du glissement (planaire/dévié). Un constat similaire est fait par Haddou et al. [259,263]. Ces auteurs montrent que le stade I de traction, caractérisé par l'activation d'un seul système de glissement, est favorisé pour les métaux à plus faible valeur de $\gamma_{SFE}/\mu b$ et plus grande taille de grain. La fraction de cristaux en glissement simple serait donc affecté par l'énergie de faute d'empilement du matériau, mais aussi par la taille moyenne de grains.

On note toutefois que la distribution hétérogène de la taille grains a aussi un impact sur le durcissement polycristallin [264,265]. L'effet de la distribution des tailles de grains sur le comportement en traction a été mis en évidence numériquement par Berbenni et al. [266,267]. Ces auteurs ont montré que la limite d'élasticité globale dépend non seulement de la taille moyenne des grains, mais également de la forme de la distribution de la taille des grains. Le rôle de la dispersion étant plus important lorsque la taille moyenne des grains est faible : $\phi < 1\mu m$.

Ce chapitre, qui se décompose en deux parties, vise à apporter des éléments supplémentaires à ces sujets fondamentaux. Dans la première partie, nous proposons une amélioration du modèle présenté dans le Chapitre 3, de façon à éliminer la partition du triangle standard, dont la délimitation nécessite de nombreuses observations expérimentales. Pour cela, une loi permettant de décrire l'évolution de la densité de dislocations en fonction du type d'interaction entre les systèmes de glissement est introduite. Cette loi unifiée repose sur des études en dynamique de dislocation discrète réalisées par de Kubin et al. [10].

Dans la seconde partie, il est proposé d'améliorer la prise en compte de la localisation du glissement plastique dans des fines bandes de glissement (BG), observées en traction monotone comme en chargement cyclique. Les BG ont été observées dans de nombreux alliages CFCs, comme les alliages de Cu-Zn [268–275], le Cu-Al [253,276–278] et l'acier 316L [86,87,279], mais également dans le cas des métaux purs, tels que l'argent [268], le plomb [280], le cuivre [268,281], le nickel [282] et l'aluminium [256,283].

En effet, il est observé expérimentalement que la majorité de la déformation viscoplastique est localisé dans des fines bandes de glissement [284–286]. Le rôle des bandes de glissement (BG) sur l'écroutissage de polycristaux a été démontré par Collard et al. [287]. A partir d'un modèle capable de décrire la localisation de déformation plastique dans les BG, ces auteurs démontrent la forte influence de la taille des grains, l'épaisseur des bandes de glissement et de la distance inter-bandes sur le comportement global du matériau.

Comme nous le montrons dans la Section 4.3, les caractéristiques physiques des bandes de glissement varient fortement en fonction de l'énergie de faute d'empilement normalisée de chaque matériau. Pour prendre en compte l'effet de ces bandes de glissement sur le comportement mécanique, nous proposons un modèle de transition de d'échelle, d'application simplifiée, basé sur la localisation de la déformation plastique dans de fines bandes de géométrie type « penny-shape » ($L_1 = L_2 \gg e$) [288]. Le modèle proposé est testé et confronté aux résultats expérimentaux. L'effet de l'énergie de faute d'empilement sur le coefficient normalisé de Hall-Petch, sur le nombre de système de glissement activé, sur la linéarité de l'écroissage et sa dépendance en fonction de la taille moyenne des grains sont discutés.

4.2 Prise en compte de l'interaction entre les systèmes de glissement dans l'évolution de la densité de dislocations

Les études sur les monocristaux purs montrent que les courbes contrainte-déformation des cristaux CFC présentent des stades de durcissement bien définis, fortement dépendant de l'orientation cristalline. Ce comportement est relié au libre parcours moyen (L), c'est-à-dire, la distance moyenne parcourue par une dislocation avant d'être bloquée par des obstacles de type « arbre de forêt ».

A partir d'une étude numérique approfondie basée sur la dynamique des dislocations, une formulation a été proposée par Kubin et al. [10] pour décrire l'évolution de la densité de dislocations totale dans un grain. La densité de dislocation totale est définie par la contribution des différentes interactions entre les systèmes de glissement.

Le premier type d'interaction dit auto-interaction se manifeste lors de la phase de durcissement à faible contrainte, également appelée Stade I, qui est observée lorsqu'un seul système de glissement est actif. Une faible densité de dislocations est produite dans les plans de glissement du système primaire. Pour ce type d'interaction, le terme de création de dislocations s'écrit sous la forme :

$$\forall i = j \rightarrow \frac{\dot{\rho}_i}{\dot{\gamma}_i} = \frac{1}{b} \cdot \frac{\sqrt{h_0 \rho_i}}{K_{self}} \quad \text{Équation 4.2}$$

Le deuxième terme de cette formulation est lié aux interactions des dislocations coplanaires. Un glissement coplanaire est observé pour des cristaux d'orientation proche de la direction [011] [289]. Les interactions coplanaires et les auto-interactions ont en commun la formation d'une faible densité de dislocations. Kubin et al. [10] modélisent ce type d'interaction de manière similaire à celle de l'auto interaction. Le terme de production de dislocations s'exprime par :

$$\forall (i, j)_{\text{copla}} \rightarrow \frac{\dot{\rho}_i}{\dot{\gamma}_i} = \frac{1}{b} \cdot \frac{\sum_{j \in \text{copla } i} \sqrt{h_{\text{copla}} \rho_i}}{K_{\text{copla}}} \quad \text{Équation 4.3}$$

Un troisième terme permet de décrire les interactions entre les dislocations des systèmes glissement capables de former de jonctions de type « arbres de la forêt ». Dans le cas des métaux CFC trois types de jonctions sont observées : Hirth, Lomer-Cottrell et glissiles. Selon ces auteurs, les forces liées à ces trois types de jonctions sont du même ordre de grandeur. Pour ces trois types de jonctions, le terme de production de la densité de dislocations est regroupé dans un même terme, qui s'exprime par :

$$\forall (i, j)_{\text{Hirth}} \text{ ou } (i, j)_{\text{Lomer}} \text{ ou } (i, j)_{\text{gliss}} \rightarrow \frac{\dot{\rho}_i}{\dot{\gamma}_i} = \frac{1}{b} \cdot \frac{\sqrt{h_{ij} \rho_i}}{K_{\text{jonction}}} \quad \text{Équation 4.4}$$

Il reste à décrire les interactions de type colinéaire, liées à l'activation simultanée d'un système de glissement et de son système de glissement dévié. Selon Kubin et al. [10], les interactions colinéaires peuvent être modélisées comme un type particulier d'interaction de la forêt entraînant la formation de jonctions avec un vecteur de Burgers nul. Ce terme est donc négligé.

En considérant tous ces types d'interaction entre les systèmes de glissement, Kubin et al. [10] proposent d'exprimer le terme de production global de la densité de dislocation totale par la loi additive suivante :

$$\frac{\dot{\rho}_i}{\dot{\gamma}_i} = \frac{1}{b} \cdot \left(\frac{\sqrt{h_{ij} \rho_i}}{K_{\text{jonction}}} + \frac{\sum_{j \in \text{copla } i} \sqrt{h_{\text{copla}} \rho_i}}{K_{\text{copla}}} + \frac{\sqrt{h_0 \rho_i}}{K_{\text{self}}} \right) \quad \text{Équation 4.5}$$

Où K_{self} , K_{copla} et K_{jonction} sont des paramètres liés à chaque type d'interaction. Ces paramètres peuvent être identifiés à partir des courbes de traction réalisées sur des monocristaux de différentes orientations cristallines ou calculés par la dynamique des dislocations discrète.

4.2.1 Modification du modèle pour prendre en compte les interactions entre systèmes de glissement

Comme cela a été présenté dans le chapitre précédent, deux populations de dislocations mobiles sont considérées dans le modèle proposé : les dislocations vis, s , et coins, e . Les lois d'évolution de la densité des dislocations sont rappelées dans les équations ci-dessous :

$$\dot{\rho}_e^i = \frac{2}{bL} \cdot \dot{\gamma}_s^i \cdot \text{sign} \left(\frac{\dot{\gamma}_s^i}{\dot{\gamma}_s^i} \right) - \frac{2y_e}{b} \cdot \rho_e^i \cdot |\dot{\gamma}_e^i| - 2\rho_e^i \cdot \frac{h_{\text{max}} - y_e}{b} \cdot |\dot{\gamma}_e^i| \quad \text{Équation 4.6}$$

$$\dot{\rho}_s^i = \frac{2}{bL} \cdot \dot{\gamma}_e^i \cdot \text{sign}\left(\frac{\dot{\gamma}_e^i}{\dot{\gamma}_e^i}\right) - \frac{2y_s}{b} \cdot \rho_s^i \cdot |\dot{\gamma}_s^i| \quad \text{Équation 4.7}$$

La modification proposée consiste uniquement à évaluer le libre parcours moyen, L , sur la base du modèle additif proposé par Kubin et al. [10]. La nouvelle formulation prend en compte la contribution des interactions entre les systèmes de glissement, et s'exprime par :

$$L = \min \left[\left(\frac{\sqrt{h_{ij}\rho_j}}{K_{jonction}} + \frac{\sum_{j \in \text{copla } i} \sqrt{h_{copla}\rho^j}}{K_{copla}} + \frac{\sqrt{h_0\rho^j}}{K_{self}} \right)^{-1} ; \Phi \right] \quad \text{Équation 4.8}$$

Dans ces conditions, la partition du triangle standard par le paramètre R_{crit} n'est plus utile pour déterminer L . De plus, la prise en compte de chaque type d'interaction entre les systèmes de glissement, doit permettre de reproduire la répartition en deux familles de cristaux : les grains orientés en glissement simple et les grains orientés en glissement multiple.

4.2.1.1 Identification des paramètres d'interaction

Les trois paramètres définissant le libre parcours moyen des dislocations, $K_{jonction}$, K_{copla} et K_{self} sont identifiés à partir de courbes de traction réalisées sur des monocristaux de différentes orientations cristallines à température ambiante. Dans le cas du paramètre $K_{jonction}$, des essais pour lequel l'axe de traction est parallèle aux directions [001] ou [111] du monocristal sont utilisées. Pour les interactions coplanaires, un axe de traction proche de la direction cristallographique [011] est envisagé. Pour K_{self} , des monocristaux orientés en glissement simple sont considérés.

Pour approfondir cette étude, ces paramètres sont identifiés pour différents métaux CFC : Cu30%Zn, 316L(N), Ag, Cu, Ni et Al. L'identification est réalisée par comparaison des courbes expérimentales aux courbes prédites en intégrant les Équation 5-8, proposé dans l'hypothèse d'un comportement élasto-plastique. Pour cela, les calculs sont réalisés avec un volume d'activation très élevé ($V=20000b^3$, $Q=1.5eV$) de sorte que l'effet du temps sur le comportement des matériaux puisse être négligé. Le Tableau 4.1 présente les paramètres et constantes physiques communs à tous ces matériaux.

Tableau 4.1 Liste de paramètres et constants communs aux métaux CFC. Cst : Constante physique ; DDD : dynamique des dislocations discrètes.

« List of parameters and constants common to the FCC metals. Cst: Physical constant; DDD: discrete dislocation dynamics »

	Paramètres	Value	Ref.	
κ_b	Constante de Boltzmann	$1.38 \cdot 10^{-23} \text{ J.K}^{-1}$	[34]	Cst.
ν_D	Fréquence de Debye	10^{13} s^{-1}	[34]	Cst.
h_0	Auto-interaction	0.122	[10]	DDD
h_{copla}	Interactions coplanaires	0.122	[10]	DDD
h_{Lomer}	Jonctions de Lomer–Cottrell	0.122	[10]	DDD
h_{Hirth}	Jonctions de Hirth	0.070	[10]	DDD
h_{glis}	Jonctions glissiles	0.137	[10]	DDD
h_{coll}	Interactions colinéaires	0.625	[10]	DDD
Q	Énergie d'activation	1.5 e.V.		
V	Volume d'activation	$20000b^3$		

Pour chacun des matériaux considérés, le Tableau 4.2 présente les valeurs des paramètres déterminés expérimentalement. La valeur de l'énergie de faute d'empilement normalisée par le produit μb est également indiquée. La valeur isotrope de μ est utilisée.

Tableau 4.2 Paramètres utilisés pour les différents métaux FCC considérés
« Parameters used for the considered FCC metals »

	Cu30%Zn [216,272,290]	316L [14,35,216]	Ag [216,291,292]	Cu [235,293]	Ni [229,294]	Al [229,236,295]
Υ (GPa)	104	200	78,8	120	214	70
b (nm)	2,61	2,54	2,54	2,56	2,49	2,86
ν	0,33	0,33	0,364	0,32	0,32	0,345
y_e (nm)	1,2	1,2	1,2	1,6	2,0	3,0
y_s (nm)	5	15	18,5	50	50	300
τ_o (MPa)	20	90	0,3	2,6	3,0	0,8
$\gamma_{EDE} / \mu b$ (10^{-3})	0,7	1,6	2,6	4,7	5,9	19,6

Les valeurs des paramètres, $K_{jonction}$, K_{copla} et K_{self} identifiées à partir des courbes de traction des monocristaux (Figure 4.2) sont présentées dans le Tableau 4.3. Certains paramètres n'ont pas pu être identifiés en l'absence de données disponibles pour toutes les orientations cristallines.

Tableau 4.3 Paramètres identifiés sur les courbes des monocristaux des différents métaux FCC.
« Parameters identified from single crystals tensile curves of different FCC metals. »

	Cu30%Zn	316LN	Ag	Cu	Ni	Al
$K_{jonction}$	-	25	-	25	60	50
K_{copla}	1000	-	600	250	-	80
K_{self}	2000	1000	800	600	400	300

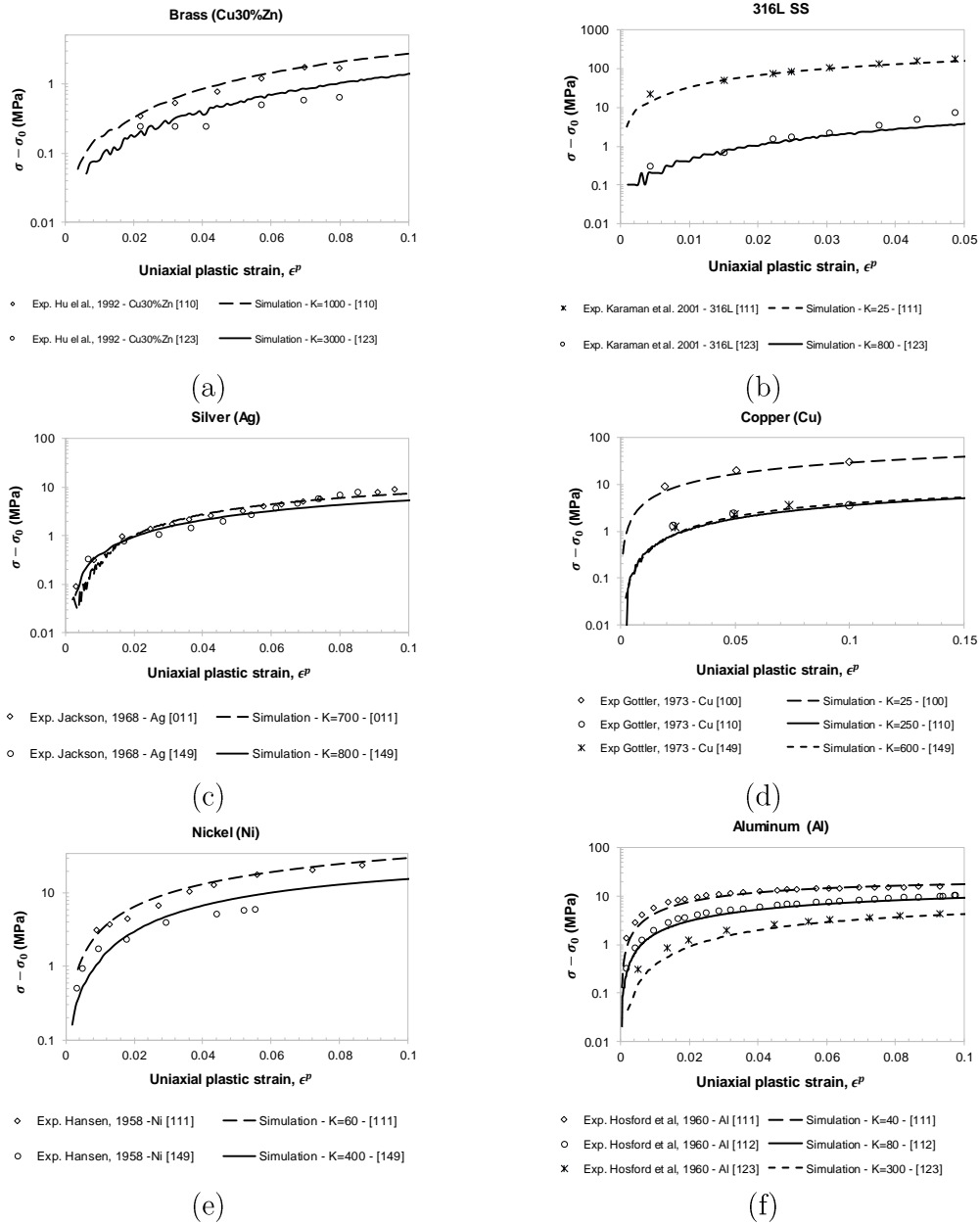


Figure 4.2 Comparaison entre les courbes de traction calculées et expérimentales à température ambiante des monocristaux de différentes orientations cristallines. (a) Cu30%Zn [272], (b) Acier 316L [14], (c) Argent [291], (d) Cuivre [293], (e) Nickel [294] et (f) Aluminium [295].

« Comparison between calculated and experimental single crystal tensile curves at room temperature. (a) Cu30%Zn [272], (b) 316L SS [14] (c) Silver [291], (d) Copper [293], (e) Nickel [294] and (f) Aluminum [295]. »

4.2.1.2 Effet de l'énergie de faute d'empilement

Comme cela a été dit précédemment, l'énergie de faute d'empilement joue un rôle important sur le comportement plastique du matériau. Dans le cas des métaux purs comme l'aluminium et le nickel, une valeur élevée de $\gamma_{SFE}/\mu b$, favorise l'activation des systèmes de glissement secondaires [79]. Il est intéressant d'analyser l'effet de l'énergie de faute d'empilement normalisée sur les taux de production des dislocations correspondant à chaque type d'interaction entre les systèmes de glissement. La Figure 4.3 montre la

dépendance des valeurs des coefficients de production des dislocations avec l'énergie de faute d'empilement.

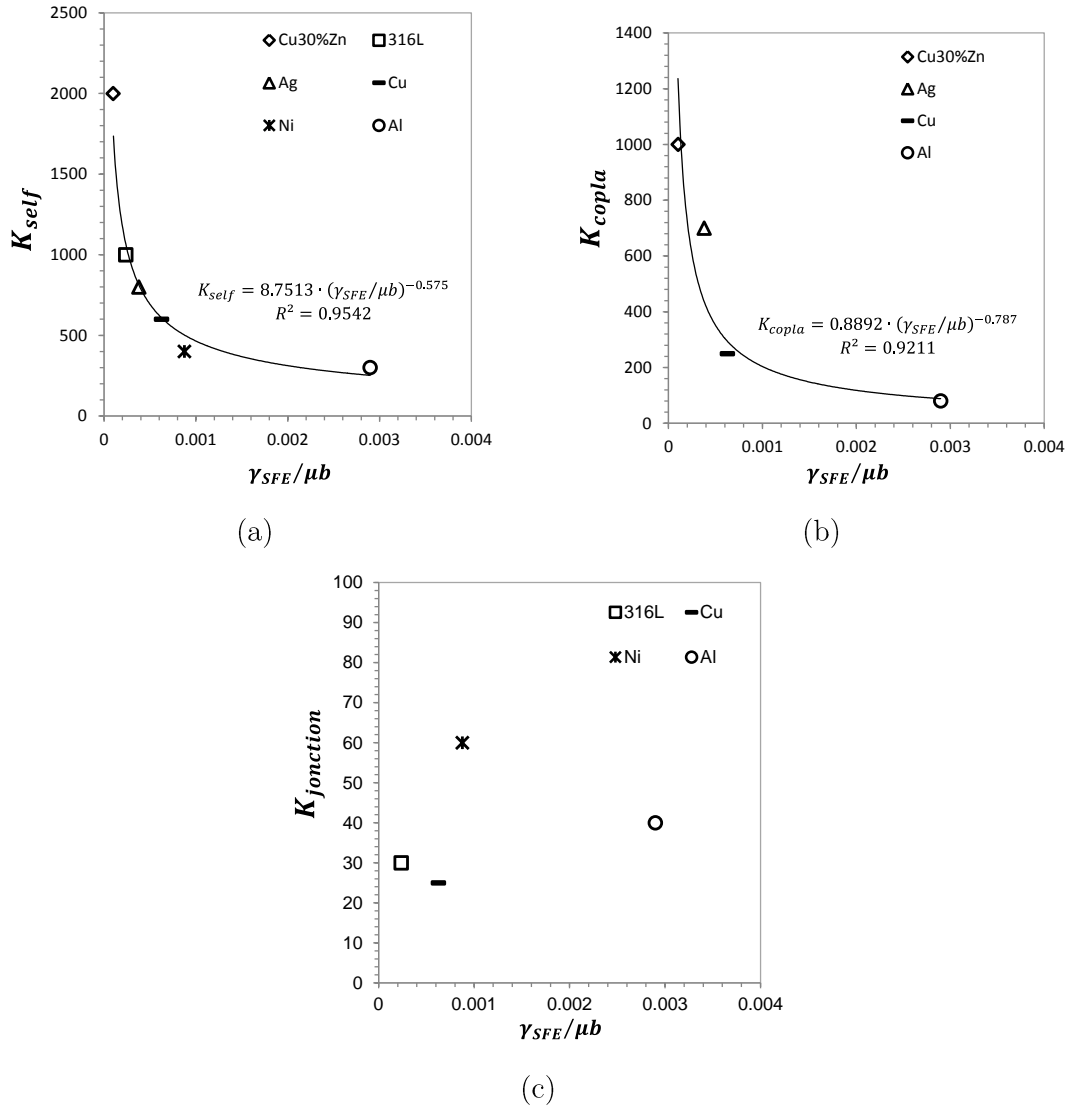


Figure 4.3 Evolution des paramètres (a) K_{self} , (b) K_{copla} et (c) $K_{jonction}$ en fonction de l'énergie de faute d'empilement normalisée par le produit μb .

« Evolution of parameters (a) K_{self} , (b) K_{copla} and (c) $K_{jonction}$ as a function of the stacking fault energy normalized by μb . »

Dans le cas des cristaux orientés en glissement simple, le coefficient K_{self} diminue fortement lorsque le rapport $\gamma_{SFE}/\mu b$ augmente. Une loi de type puissance est observée (Figure 4.3a). Une valeur plus élevée de ce coefficient indique une plus forte tendance du matériau à se déformer en glissement simple. En effet, une valeur élevée de K_{self} , conduit à un fort durcissement pour le système primaire, ce qui retarde l'activation des systèmes secondaires.

Selon Kubin et al. [10], les interactions coplanaires et les auto-interactions présentent des caractéristiques similaires et peuvent être traitées de la même manière. Toutefois, les paramètres identifiés sur les courbes de traction des monocristaux indiquent que K_{self} vaut

environ le double de K_{copla} . Comme pour le paramètre K_{self} , une diminution de la valeur de K_{copla} est observée lorsque le rapport $\gamma_{SFE}/\mu b$ augmente

Aucune évolution du coefficient $K_{jonction}$, avec l'énergie de faute d'empilement ne peut être clairement mise en évidence. Dans le cas des interactions de type « arbre de la forêt », le coefficient $K_{jonction}$ a été identifié en utilisant des essais de traction sur des monocristaux orientés dans les directions [100] et [111], pour lesquels l'activation multiple de systèmes de glissement est naturellement attendu, même dans le cas de métaux à faible rapport $\gamma_{SFE}/\mu b$, comme l'argent et l'acier 316L(N).

4.2.1.3 Effet de la température

Il est montré que l'énergie de faute d'empilement des métaux CFC varie avec la température. Dans le cas du cuivre, du nickel et de l'aluminium, Bhogra et al. [296] ont démontré que γ_{SFE} décroît avec l'augmentation de la température, dans un intervalle entre $[0 - 0.8]T_M$ (où T_M est la température de fusion). Cette tendance est également observée dans le cas de l'argent [297]. Par contre, l'énergie de faute d'empilement tend à augmenter avec la température dans le cas de l'alliage Cu30%Zn [297,298] et de l'acier 316L [297,299,300]

En vue de l'extension du modèle aux températures élevées, il est également intéressant d'évaluer comment les coefficients $K_{jonction}$, K_{copla} et K_{self} varient avec la température. La Figure 4.4 présente les valeurs des coefficients identifiées pour le cuivre et l'aluminium, sur la base de courbes de traction expérimentales réalisées à différentes températures [289,295].

Aucune évolution significative des paramètres avec la température n'est observée. Ce résultat paraît surprenant puisque nous attendons une évolution de K_{copla} et K_{self} en lien avec la variation de $\gamma_{SFE}/\mu b$ avec la température. En l'absence de données expérimentales pour l'acier 316L(N), nous pouvons considérer que les coefficients n'évoluent pas avec la température.

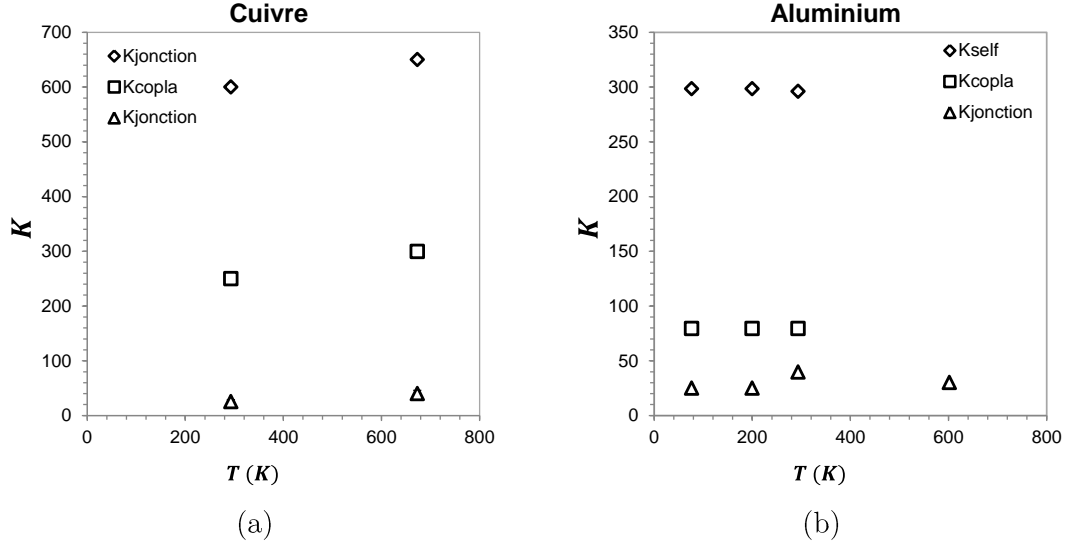


Figure 4.4 Evolution des paramètres K_{self} , K_{copla} et $K_{jonction}$ en fonction de la température : (a) Cuivre et (b) Aluminium

« Evolution of K_{self} , K_{copla} and $K_{jonction}$ parameters as a function of temperature: (a) Copper and (b) Aluminium »

4.2.2 Prédiction de la partition du triangle standard dans le cas de l'acier 316L(N)

L'introduction du modèle additif permet d'évaluer directement l'effet de l'orientation cristalline sur le nombre de systèmes de glissement activés sans hypothèse sur une valeur critique du rapport R , en se basant sur des observations MET par exemple. Pour illustrer cette amélioration du modèle, nous étudions le cas de monocristaux en acier 316L(N) sous une sollicitation monotone en traction à température ambiante.

La Figure 4.5 présente la projection du nombre de système de glissement activés calculés pour différentes orientations cristallines de monocristaux de 316L(N) dans le triangle standard, pour une déformation de 3%. Un système est dit activé si $|\gamma_i^P| > 10^{-5}$. Sur cette figure, nous avons également indiqué, pour les orientations considérées, la valeur et du rapport $R = \tau_{secondary}/\tau_{primary}$. L'iso-valeur $R = 0,97$, correspondant à la valeur critique utilisée dans le Chapitre 3, est également reportée sur la Figure 4.5. Il est important de noter que la rotation du réseau cristallin n'est pas prise en compte dans le modèle.

Nous pouvons observer que la modification proposée du modèle permet de rendre compte de la limite entre les cristaux en glissement simple et ceux en glissement multiple. Cette limite est en bon accord avec la valeur déterminée dans le Chapitre 3, à partir des observations faites par microscopie électronique à transmission (MET). Toutefois, il faut remarquer que l'utilisation de ces lois dans le cas d'un polycristal peut modifier considérablement le nombre de grains en glissement simple. Les lois de transition d'échelle peuvent induire à des contraintes internes élevées, en favorisant l'activation des systèmes secondaires.

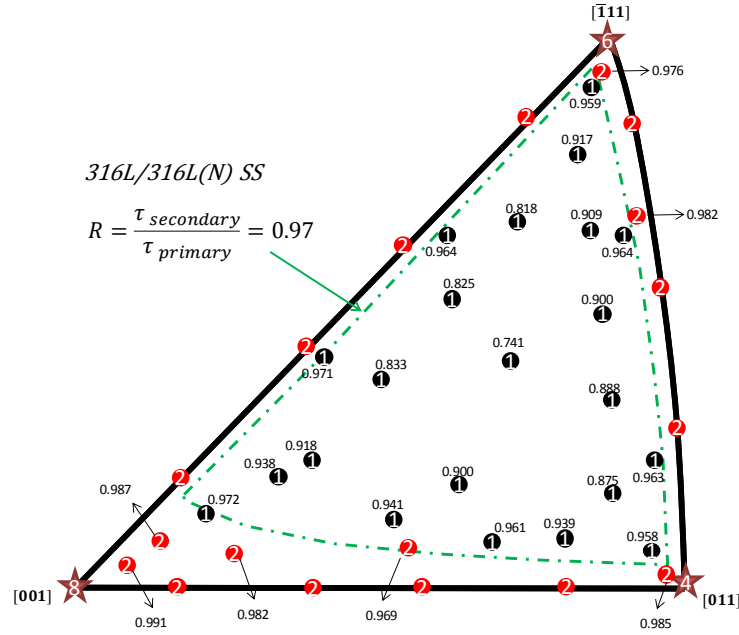


Figure 4.5 Nombre de systèmes activés et rapport $\tau_{secondary}/\tau_{primary}$ calculés pour différentes orientations de monocristaux, pour une déformation en traction à $E = 3\%$, dans le cas de l'acier 316L(N) à température ambiante.

« Number of activated slip system and $\tau_{secondary}/\tau_{primary}$ ratio calculated for different monocrystalline orientations after tensile tests at $E = 3\%$, in the case of 316L(N) SS at room temperature. »

4.2.3 Prédiction de l'effet Hall-Petch

La prise en compte de taille de grain moyenne dans ce modèle est faite par l'équation du libre parcours moyen (Équation 4.8). Le coefficient de Hall-Petch, calculé pour les différents matériaux CFC à $E = 0.2\%$, en utilisant cinq tailles moyenne de grains différentes, entre $5 \mu\text{m}$ et $100 \mu\text{m}$, est comparé aux valeurs expérimentales issues de la littérature sur la Figure 4.6.

Wang et Murr [301] ont étudié l'effet de l'énergie de faute d'empilement sur l'effet Hall-Petch des matériaux CFC. Suite à une étude expérimentale sur le nickel, le cuivre et le Cu30%Zn, ces auteurs observent que le coefficient de Hall-Petch, K_{HP} , augmente lorsque le rapport $\gamma_{SFE}/\mu b$ diminue. Toutefois, cette tendance n'est pas observée par les prédictions de ces deux modèles. L'utilisation des paramètres définis pour chaque matériaux (cf. Tableau 4.2 et Tableau 4.3) ne suffit pas pour correctement rendre en compte l'effet de $\gamma_{SFE}/\mu b$ sur le coefficient de Hall-Petch. Dans la Section 4.3.2.3, il est montré que la prise en compte de la localisation de la déformation plastique dans de fines bandes de glissement permet de mieux prédire le coefficient de Hall-Petch en fonction de $\gamma_{SFE}/\mu b$.

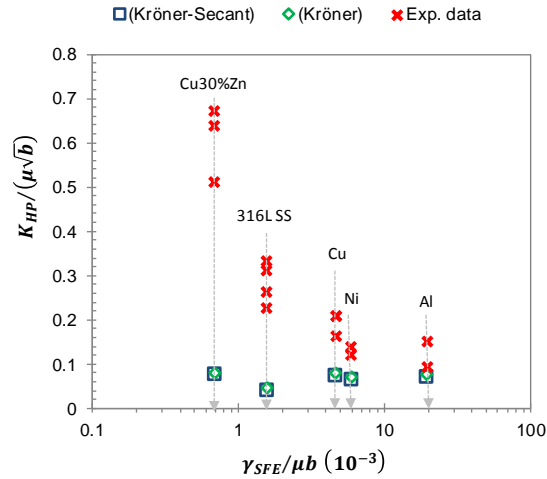


Figure 4.6 Evolution du coefficient de Hall-Petch avec l'énergie de faute d'empilement. Comparaison des résultats des modèles à champ-moyens Kröner et Kröner-Secant et les mesures expérimentales issues de [252,259,260,262,302-307].

« Evolution of the Hall-Petch coefficient with stacking fault energy. Comparison of the results of the Kröner and Kröner-Secant mean-field models and experimental measurements from [252,259,260,262,302-307]. »

4.2.4 Impact de la modification sur les prédictions du modèle à température ambiante.

La modification du modèle de comportement proposée dans ce chapitre, appelé « modèle additif » dans la suite, permet de s'affranchir de la détermination du coefficient R_{crit} . L'effet de cette modification sur la prédiction du comportement cyclique de l'acier 316L(N) à température ambiante est évalué par comparaison aux prédictions cycliques obtenues avec le modèle présenté dans le Chapitre 3, appelé « modèle de partition » dans la suite. Les deux modèles utilisent le même jeu de paramètres présentés dans le Tableau 3.2 et le Tableau 3.3. Le volume et l'énergie d'activation utilisés pour le modèle additif ont également été identifiés à partir des essais de traction à différentes température et vitesses de déformation. Le Tableau 4.4 présente les paramètres viscoplastiques et les coefficients de libre parcours moyen utilisés pour chaque modèle. La valeur de K_{copla} pour l'acier 316L(N) a été définie à partir de l'équation indiquée sur la Figure 4.3b. Dans la suite, seul le comportement de l'alliage 316L(N) est considéré avec la loi de transition d'échelle de Kröner.

Tableau 4.4 Paramètres utilisés pour les deux modèles proposés : modèle de partition du triangle standard et modèle additif.

« Parameters used by the two proposed models: standard triangle partition model and additive model. »

	Paramètres	Modèle de partition	Modèle additif
K_{multi}	Coefficient du libre parcours moyen des cristaux en glissement multiple	25	-
K_{single}	Coefficient du libre parcours moyen des cristaux en glissement simple	400	-
R_{crit}	Valeur critique du rapport R	0,97	-
K_{self}	Coefficient lié aux auto-interactions	-	1000
K_{copla}	Coefficient lié aux interactions coplanaires	-	600
$K_{joncton}$	Coefficient lié aux interactions de type jonction	-	25
V	Volume d'activation	$96b^3$	$90b^3$
Q	Énergie d'activation	1,55 e.V	1,55 e.V

L'ajustement des paramètres des deux modèles utilisant la courbe expérimentale d'un essai de traction avec sauts de vitesses est illustré sur la Figure 4.7a. Les deux courbes calculées sont très proches et en bon accord avec les données expérimentales. La densité de dislocations totale calculée par le modèle additif est légèrement inférieure à celle calculée par le modèle de partition (Figure 4.7b). Toutefois, les résultats restent cohérents avec les mesures expérimentales.

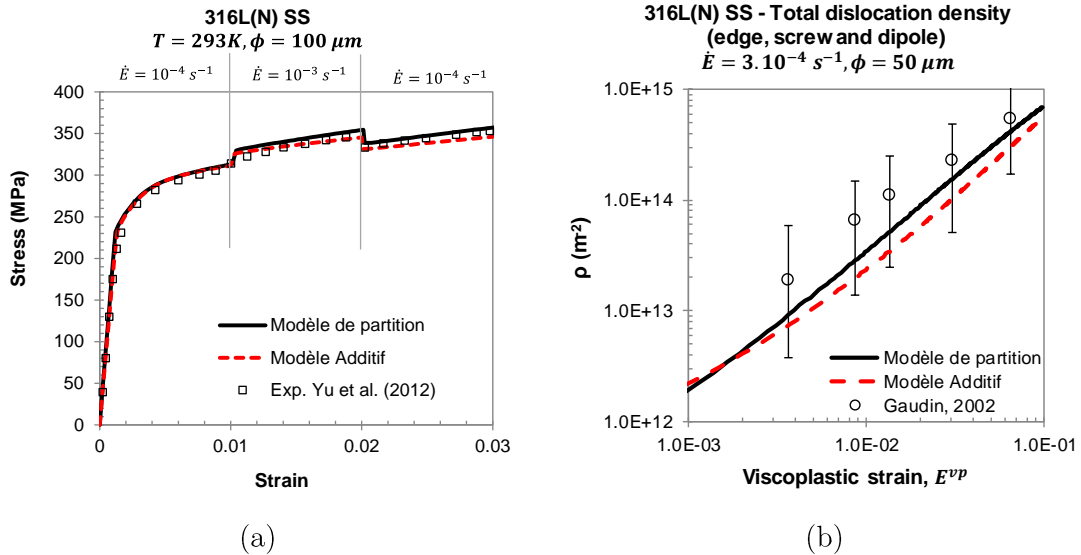


Figure 4.7 Acier 316L(N) à température ambiante. (a) Courbe de traction avec sauts de vitesses. (b) Évolution de la densité totale de dislocations en fonction de la déformation viscoplastique. [18,97].

« 316L(N) SS at room temperature. (a) Tensile curve including strain rate jump. (b) Total dislocation density evolution as a function of the viscoplastic strain [18,97]. »

4.2.4.1 Modélisation du comportement en déformation cyclique

La Figure 4.8a compare l'évolution de l'amplitude de contrainte prédite par les deux modèles aux données expérimentales acquises lors d'un essai de déformation cyclique. Les courbes contrainte-déformation au premier cycle sont reportées sur la Figure 4.8b. Le modèle additif résulte dans un durcissement cyclique moins élevé que le modèle de partition, avec une valeur de l'amplitude de contrainte au cycle stabilisé inférieure de 5%. Ce comportement est probablement lié à la densité de dislocations plus faible prédite par le modèle additif. Les deux modèles prédisent des boucles contrainte-déformation en bon accord avec les résultats expérimentaux.

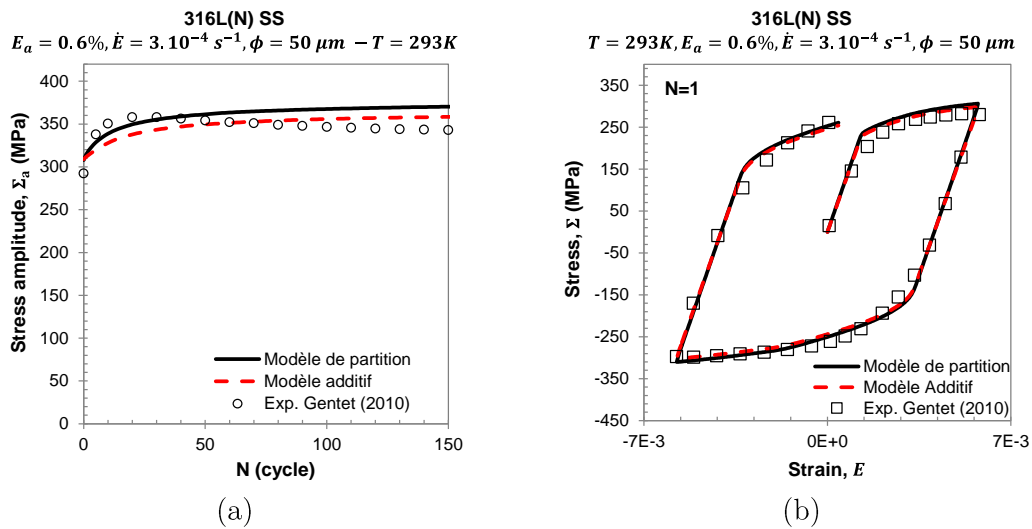


Figure 4.8 Acier 316L(N) à température ambiante. (a) Évolution de l'amplitude de contrainte en fonction du nombre de cycles. (b) Première boucle de contrainte-déformation. Déformation cyclique à $E = \pm 0.6\%$ [3].

« 316L(N) SS at room temperature. (a) Evolution of the stress amplitude with the number of cycles. (b) First stress-strain loop. Cyclic deformation at $E = \pm 0.6$ [3]. »

4.2.4.2 Modélisation du comportement en déformation progressive

La Figure 4.9 compare l'évolution de déformation axiale prédite par les deux modèles aux résultats expérimentaux d'essais de déformation progressive réalisés à une amplitude de la contrainte de 200 MPa. En conséquence de la prédiction d'un durcissement cyclique moins important, le modèle additif résulte dans une déformation progressive plus élevée que le modèle de partition. Cependant, les prédictions du modèle additif restent en bon accord avec les données expérimentales.

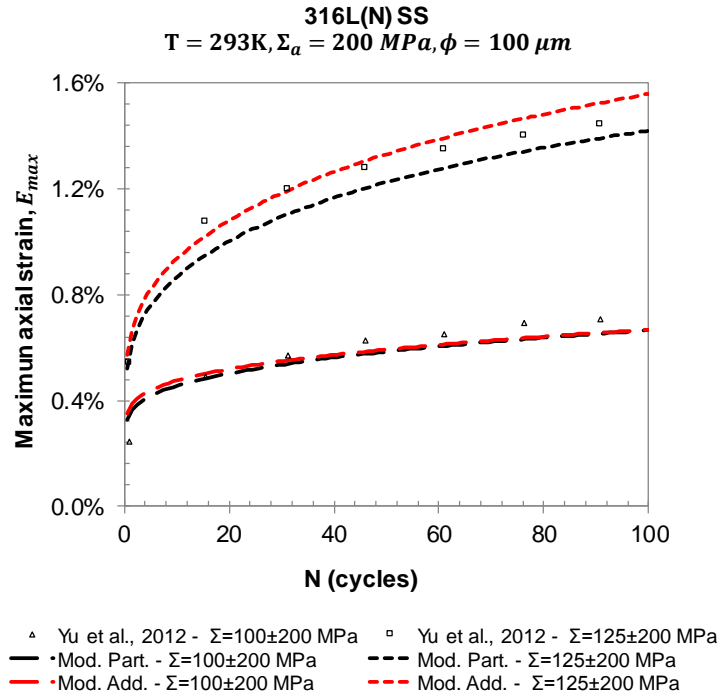


Figure 4.9 Acier 316L(N) à température ambiante. Évolution de la déformation progressive pour différents chargements en contrainte cyclique imposée [97].

« 316L(N) SS at room temperature. Ratcheting strain evolutions for different cyclic stress loadings [97]. »

4.2.4.3 Cas des chargements multiaxiaux

Dans le cas du modèle de partition, le paramètre R_{crit} a été identifié à partir des observations microstructurales de l'acier 316L(N) lors d'un essai de traction uniaxial. La validité de cette identification pour un chargement cyclique et, plus encore, dans le cas de chargements multiaxiaux reste questionnable. Le modèle additif permet de s'affranchir de cette limitation par la prise en compte de l'interaction entre les systèmes de glissement pour décrire l'évolution de la densité de dislocations.

La Figure 4.10 montre l'évolution de l'amplitude de la contrainte équivalente en fonction de l'amplitude de la déformation viscoplastique équivalente dans le cas des chargements biaxiaux en traction-compression et de torsion alternée. Les essais ont été réalisés avec un acier 316L(N) de composition chimique et taille de grain moyenne similaires à celles de la tôle SQ (cf. Tableau 3.2), de sorte qu'en première analyse les paramètres identifiés précédemment peuvent être utilisés.

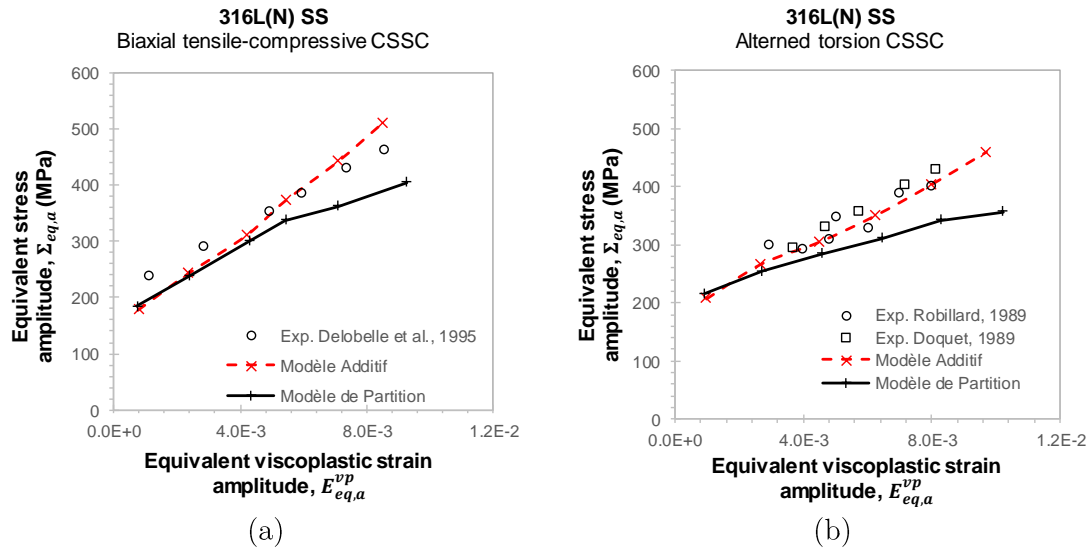


Figure 4.10 Acier 316L(N) à température ambiante. courbe contrainte-déformation cyclique sous chargements en (a) biaxial en traction-compression [309] et (b) en torsion-alternée [310,311].

« 316L(N) SS at room temperature. CSSC under (a) biaxial tensile-compressive [309] and (b) altered torsion [310,311] loading. »

Aux faibles amplitudes de déformation viscoplastique, les prédictions des deux modèles sont proches. Avec l'augmentation de l'amplitude de déformation, le modèle additif prédit une amplitude de contrainte plus élevée que celle du modèle de partition, et en meilleure accord avec les mesures expérimentales. Lors des chargements multiaxiaux, le modèle additif permet l'évolution plus précise du libre parcours moyen. Il en résulte dans un plus fort durcissement lors l'augmentation de l'amplitude de déformation viscoplastique.

Sur la Figure 4.11, nous comparons le comportement prédit par les deux modèles aux résultats expérimentaux obtenus lors d'essais de traction-torsion cycliques à température ambiante [309]. Les deux modèles prédisent bien la déformation progressive axiale (Figure 4.11a), la vitesse de rochet et l'amplitude de la contrainte Σ_{12} (Figure 4.11b et Figure 4.11c). Ce modèle paraît donc mieux adapté pour étudier le comportement cyclique de l'acier 316L(N) dans le cas de chargements multiaxiaux.

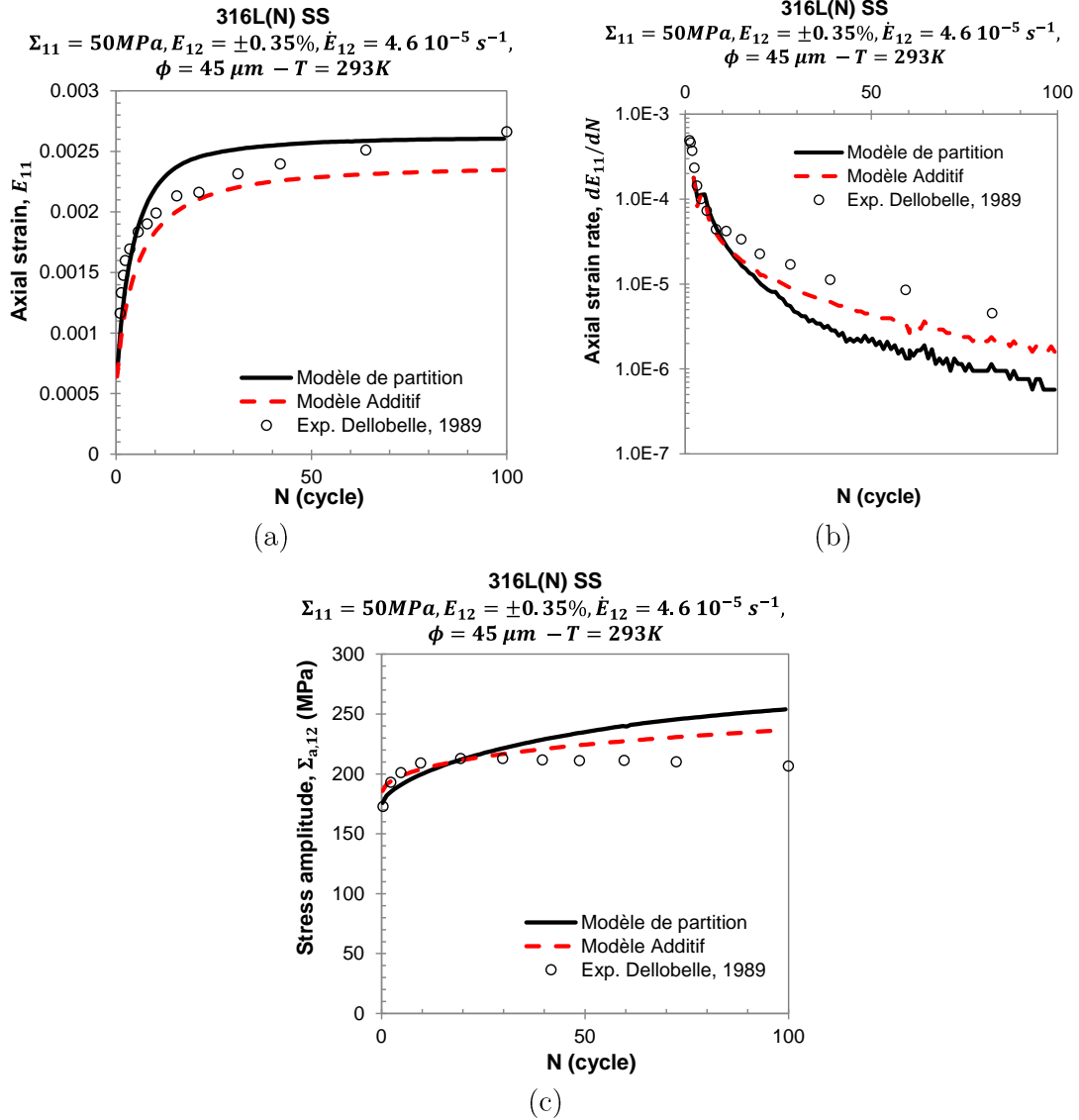


Figure 4.11 Acier 316L(N) à température ambiante. Traction-torsion (rochet 2D) : $\Sigma_{11} = 50\text{MPa}$ et $E_{12} = \pm 0.35\%$ [309]. (a) Évolution de la déformation axiale. (b) Vitesse de rochet en fonction du nombre de cycle. (c) Evolution de l'amplitude de la contrainte Σ_{12} .

« 316L(N) SS at room temperature. Tension-torsion (2D ratcheting): $\Sigma_{11} = 50\text{MPa}$ and $E_{12} = \pm 0.35\%$ [309]. (a) Axial strain evolution. (b) Ratcheting strain rate as a function of the number of cycles. (c) Shear stress amplitude evolution Σ_{12} . »

4.3 Prise en compte de la localisation de la déformation plastique

Dans les métaux CFC des observations en surface par MEB montrent la formation d'une structure dite « lignes ou bandes de glissement » (BG), lié à l'important taux de durcissement observé pour les métaux CFC. Ces BG permettent d'accommoder la plus grande partie de la déformation plastique [43,312,313]. Dans le cas de l'acier 316L(N) la mise en évidence des BG (cf. Figure 1.12) permet de constater l'activation d'un seul système de glissement dans 68% des grains (sur une population de 140 grains analysés) en traction monotone ($E = 17\%$) et d'environ 70% pour des chargements cycliques à faible amplitudes de déformation ($E_a < 0.25\%$) [139,211]

Sur la base d'observations expérimentales, deux mécanismes de création des BG sont proposés. Pour certains matériaux et dans certaines conditions, les bandes de glissement apparaissent dès le début de la déformation plastique presque simultanément. La distance inter-bandes moyenne, d_{BG} , observée entre les BG n'évolue pas avec la déformation plastique (Figure 4.12). En conséquence, la déformation plastique est globalement homogène dans toutes les BG. mécanisme a été décrite pour le Cu30%Zn [273,313], le Ni-hydrogéné [314], dans une moindre mesure, pour l'acier 316L [87,315] ainsi que le Fe- α [281,316]. Pour d'autres matériaux, présentant généralement une valeur de $\gamma_{SFE}/\mu b$ plus élevée, le nombre de bandes dans les grains augmente avec la déformation plastique et la distance entre les bandes diminue en conséquence. Dans ce cas, on peut considérer que les BG ne peuvent accommoder qu'un glissement plastique maximal. Lorsque le glissement plastique dépasse ce seuil, une autre bande est formée dans les cristaux pour accommoder le reste de la déformation appliquée. Ce mécanisme a été décrit dans les monocristaux l'aluminium [283], comme dans le polycristaux de cuivre [281], nickel [284,317], cuivre irradié [318,319] et dans l'acier 316L irradié [279].

Nous proposons des modèles de transition d'échelle basés sur la localisation de la déformation plastique à l'intérieur des BG situées au sein des grains. Ces modèles à champs-moyen doivent nous permettre de mieux rendre en compte du faible nombre de système actifs par grain et l'écroissage qui en résulte à l'échelle du polycristal. Les modèles à champ-moyen sont basés sur la solution d'Eshelby pour des inclusions élasto-plastiques de type « penny-shape » ($L_1 = L_2 \gg e$) noyées dans une matrice élastique (Figure 4.12) [288]. Les deux mécanismes de création des BG sont considérés dans la suite.

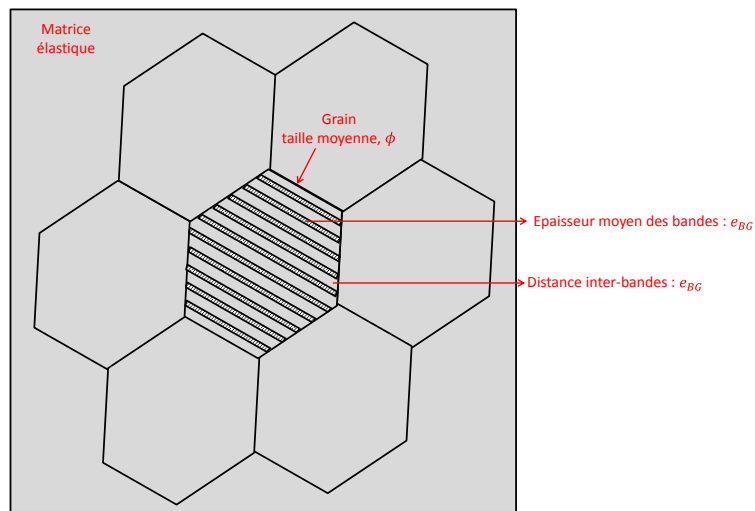


Figure 4.12 Schéma des bandes de glissement noyées dans une matrice élastique.

« Schematically view of plastic slip bands embedded in an elastic matrix.

4.3.1 Description des modèles à bande de glissement

Pour calculer le tenseur de contraintes dans une bande de glissement en fonction de son glissement plastique, les relations d'Eshelby [155,288] sont utilisées. En première approximation, différentes hypothèses sont adoptées dans chaque grain :

1. L'état de contrainte dans une bande est supposé uniforme et indépendant de la bande considérée. La contrainte résolue sur le système de glissement i dans la bande de glissement peut être déterminée par la loi de Schmid : $\tau_{BG}^i = \underline{\underline{\sigma}} : (\underline{\underline{m}}^i \otimes \underline{\underline{n}}^i)$, où $\underline{\underline{m}}^i$ est le vecteur unitaire dans la direction du glissement et $\underline{\underline{n}}^i$ est la normale au plan de glissement. Toutes les observations montrent que les bandes de glissement sont perpendiculaires à un des axes $\langle 111 \rangle$.
2. Le modèle thermoélastique d'Eshelby est appliqué sur la configuration d'une ellipsoïde isolée de type « penny-shape » : $L_1 = L_2 = \phi$ et $e_{BG} \ll \phi$ (Figure 4.13).

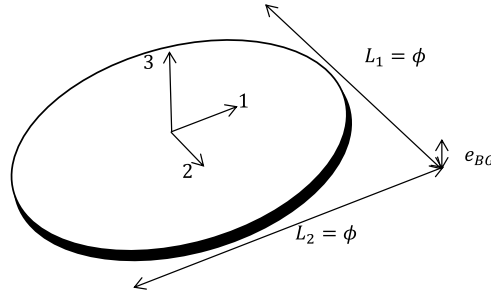


Figure 4.13 Schéma d'un ellipsoïde de type « penny-shape »
« Schematic view of a penny-shaped ellipsoid »

3. Les bandes sont considérées suffisamment longues et proches ($d_{BG} \ll \phi$, avec d_{BG} la distance interbande), pour que l'état de contraintes soit supposé homogène dans chaque grain. Dans le cas où les bandes sont resserrées avec la déformation plastique, l'écart de contrainte moyen des ligaments élastiques est supposé proche de celui des bandes.

4.3.1.1 Modèle à distance inter-bandes constante

Nous considérons que les bandes de glissement fines, capables d'accommoder la totalité de la déformation plastique du grain, sont entourée par un milieu élastique isotrope infini. Ces bandes sont caractérisées par une épaisseur moyenne, e_{BG} , et par une distance interbande, d_{BG} . Par simplification, nous considérons que toutes les bandes ont une longueur égale à la taille des grains, ϕ . La fraction de bandes, f_{BG} , dans un cristal est donc définie par :

$$f_{BG} = e_{BG}/d_{BG} \quad \text{Équation 4.9}$$

La déformation plastique dans la bande est définie par la somme du glissement des dislocations vis et coins sur un système de glissement i :

$$\gamma_i^p = \gamma_{e,i} + \gamma_{s,i} \quad \text{Équation 4.10}$$

Toutes les dislocations glissiles sont supposées situées dans les bandes de glissement et le reste du grain est supposé élastique, en accord avec les observations expérimentales [284–286]. Selon la relation d'Eshelby, la contrainte dans une bande de glissement peut s'écrire par [320,321] :

$$\tau_{BG}^i = T^i - \mu \frac{e_{BG}}{\phi} \gamma_i^p \quad \text{Équation 4.11}$$

T^i représente la contrainte à l'échelle macroscopique parallèle à la bande. Le tenseur de déformations plastiques moyenne du grain s'exprime par :

$$\underline{\underline{\epsilon}}^p = f_{BG} \cdot \gamma_i^p \cdot \frac{1}{2} \cdot (\underline{\underline{n}}_i \underline{\underline{m}}_i^T + \underline{\underline{m}}_i \underline{\underline{n}}_i^T) \quad \text{Équation 4.12}$$

La contrainte étant supposée uniforme sur toutes les bandes, on la relie à la contrainte moyenne dans le grain par :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{\Sigma}} - \mu \cdot \frac{d_{BG} - e_{BG}}{d_{BG} + \phi} \cdot \underline{\underline{\epsilon}}^p \quad \text{Équation 4.13}$$

Le facteur non-dimensionnel $\frac{d_{BG} - e_{BG}}{d_{BG} + \phi}$ représente un paramètre de forme de la microstructure.

4.3.1.2 Modèle avec multiplication des bandes

Comme précédemment, nous considérons que les bandes de glissement sont noyées dans un milieu élastique isotrope. Toutefois, le nombre de bandes dans le cristal augmente avec la déformation plastique. Lorsque le glissement dans une bande active atteint une valeur critique de déformation plastique, $\gamma_{BG,crit}^p$, une nouvelle bande apparaît dans le cristal pour accommoder la déformation. L'évolution du nombre de bandes pour le système de glissement i peut être exprimé par :

$$N_{BG,i} = \text{entier} \left[\left(\frac{\phi}{e_{BG}} \right) \cdot \left(\frac{\gamma_i^p}{\gamma_{BG,crit}^p} \right) \right] + 1 \quad \text{Équation 4.14}$$

L'évolution correspondante de la distance interbande, $d_{BG,i}$, s'exprime par :

$$d_{BG,i} = \frac{\phi - N_{BG,i} \cdot e_{BG}}{N_{BG,i} + 1} \quad \text{Équation 4.15}$$

La fraction de bandes définie par système de glissement, $f_{BG,i}$, dans un cristal est donc définie par :

$$f_{BG,i} = e_{BG}/d_{BG,i} \quad \text{Équation 4.16}$$

La déformation plastique dans la dernière bande crée est donnée par :

$$\gamma_{BG,i}^p = \gamma_i^p \cdot \left(\frac{\phi}{e_{BG}} \right) - \gamma_{BG,crit}^p \cdot (N_{BG,i} - 1) \quad \text{Équation 4.17}$$

La déformation plastique moyenne dans le cristal s'exprime par :

$$\underline{\underline{\epsilon}}^p = f_{BG,i} \cdot \left[\frac{(N_{BG,i} - 1) \cdot \gamma_{BG,crit}^p + \gamma_{BG,i}^p}{N_{BG,i}} \right] \cdot \frac{1}{2} \cdot (\underline{n}_i \underline{m}_i^T + \underline{m}_i \underline{n}_i^T) \quad \text{Équation 4.18}$$

En utilisant les hypothèses 1 à 3 évoquées précédemment, la contrainte dans le grain est alors calculée par :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{\Sigma}} - \mu \cdot \frac{d_{BG,i} - e_{BG}}{d_{BG,i} + \phi} \cdot \underline{\underline{\epsilon}} \quad \text{Équation 4.19}$$

4.3.2 Application du modèle à l'étude du comportement en traction des polycristaux CFC

Le Tableau 4.5 indique les caractéristiques physiques des BG mesurées les différentes métaux et alliages CFC après des essais de traction à température ambiante.

Tableau 4.5 Caractéristiques de bandes de glissement mesurées pour différents métaux et alliages CFC.

« Slip band characteristics measured for different FCC metals and alloys. »

	e_{BG}	d_{BG}	$\gamma_{BG,crit}^p$	Ref.
Cu-30%Zn	$0.02\mu m$	$0.1\mu m$	Variable	[273]
316L SS	$0.1\mu m - 0.2\mu m$	$0.7\mu m - 2\mu m$	Variable	[86,87,322]
Cu	-	Variable	0.27	[281]
Al	$0.35\mu m$	Variable	0.4	[283]

L'épaisseur des bandes de glissement présentée à la Figure 4.14 semble être dépendant de la valeur de $\gamma_{SFE}/\mu b$. Pour le cuivre, cette valeur peut être par interpolation entre les valeurs mesurées pour l'aluminium et l'acier 316L : $e_{BG_{Cu}} \approx 205nm$. Dans la suite, les paramètres indiqués dans le Tableau 4.2, le Tableau 4.3 et le Tableau 4.5. La taille de grain moyenne qui correspond à celle mesurée expérimentalement est indiquée dans les figures pour chaque cas étudié.

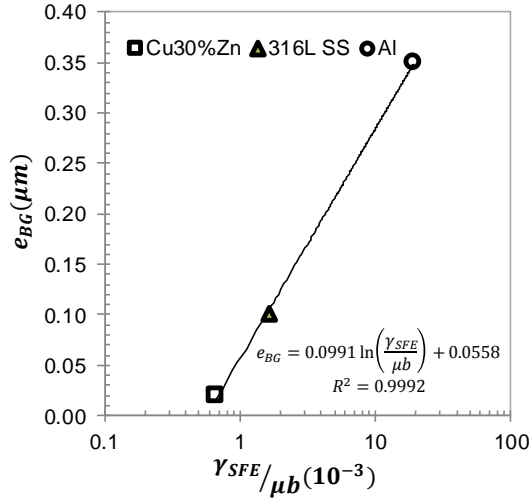


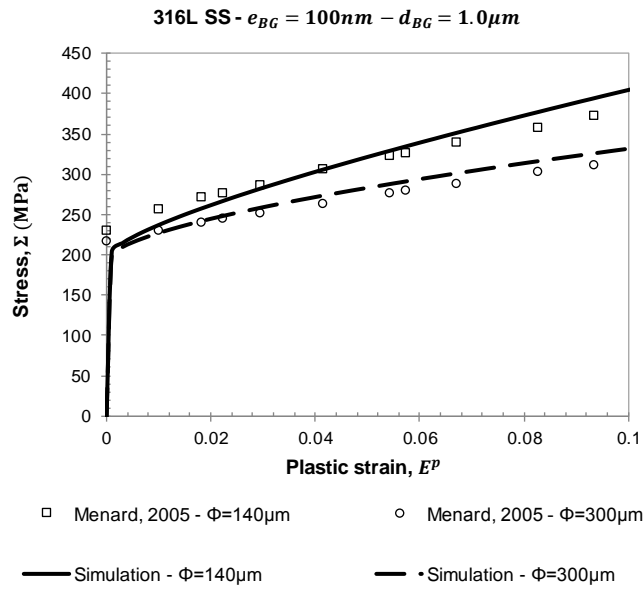
Figure 4.14 Epaisseur moyenne des bandes de glissement en fonction de $\gamma_{SFE}/\mu b$.

« Average slip band thickness as a function of $\gamma_{SFE}/\mu b$. »

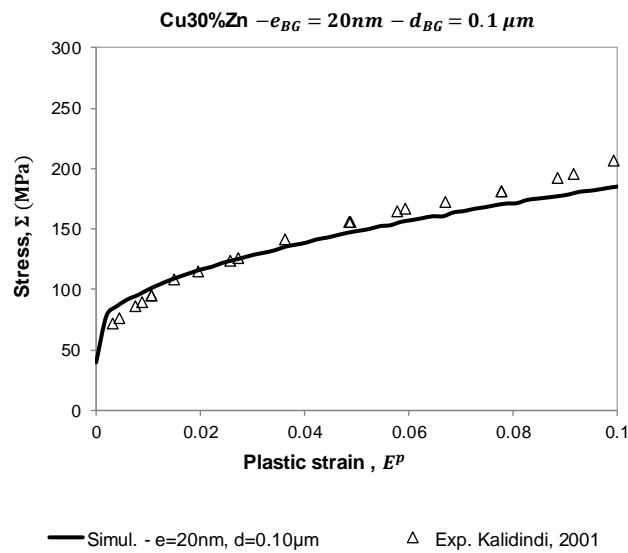
4.3.2.1 Cas des métaux à distance interbande d_{GB} constante

Sur la Figure 4.15 nous comparons les courbes de traction monotone simulées aux données expérimentales pour l'acier 316L et l'alliage Cu30%Zn à température ambiante. Pour ces matériaux, le modèle BG avec une distance d_{BG} constante est appliqué, en relatif accord avec les observations expérimentales [87,273].

Un écrouissage assez linéaire est observé avec ce type de modèle, ce qui est en bon accord avec les courbes expérimentales. Nous observons sur la Figure 4.15a que la diminution de la taille moyenne de grain résulte en un module d'écrouissage plus élevé. Cet effet peut être attribué à la localisation du glissement plastique dans un nombre plus restreint de bandes. Une augmentation du module d'écrouissage est également observée par l'augmentation de la distance inter-bandes et de l'épaisseur de la bande (Figure 4.16), ce qui est une conséquence de la loi de changement d'échelle.



(a)



(b)

Figure 4.15 Comparaison entre les prédictions du modèle et les données expérimentales pour l'acier 316L [87] et Cu30%Zn [323]. Prise en compte de la localisation. Nombre fixe de bandes.

« Comparison between computed and experimental tensile curves for 316L SS [87] and Cu30% Zn [323]. Constant number of slip bands accounting for plastic localization. »

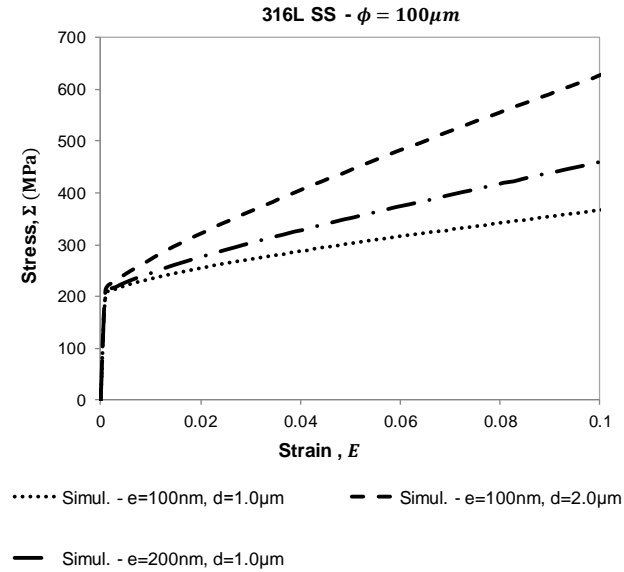
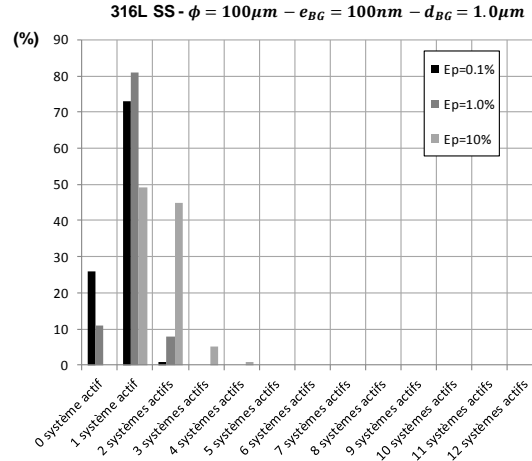


Figure 4.16 Effet de la distance interbande et de l'épaisseur de la bande sur la pente de durcissement lors d'un essai de traction.

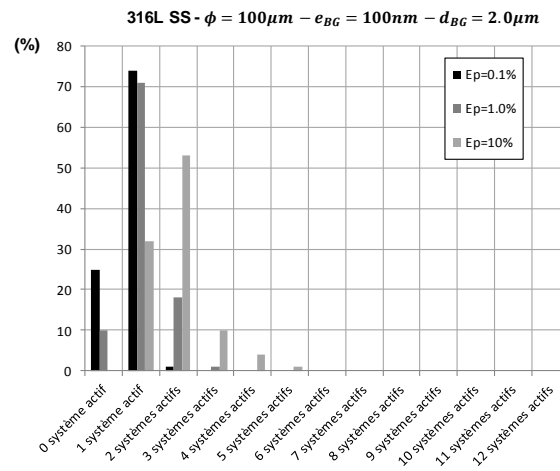
« Effect of interband distance and slip band thickness on the stress hardening during tensile test. »

Dans le cas de l'acier 316L(N), les prédictions du nombre de systèmes de glissement activés dans les grains, pour une sollicitation monotone à température ambiante, sont présentés sur la Figure 4.17. Afin d'évaluer l'impact des paramètres géométriques des BG, les calculs ont été réalisés pour différentes valeurs de d_{BG} et e_{BG} . L'augmentation de la distance d_{BG} favorise l'activation de systèmes de glissement secondaires (Figure 4.17a et Figure 4.17b). Dans le cas où $d_{BG} = 1\mu m$, 49% de grains ne présentent qu'un seul système activé pour une déformation plastique $E^p = 1\%$. Cette valeur décroît à 33% pour $d_{BG} = 2\mu m$. L'effet de l'épaisseur des bandes sur le nombre de systèmes de glissement activés est moins notable (Figure 4.17a et Figure 4.17c). Pour une déformation plastique $E^p = 1\%$, 47% des grains ne présentent qu'un seul système activé pour $e_{BG} = 200nm$. Contrairement aux modèles auto-cohérent considérant usuellement chaque grain comme étant dans son ensemble élasto-viscoplastique (cf. Chapitre 2), il est intéressant de noter que le modèle de BG prédit un nombre significatif des grains en glissement simple, en meilleur accord avec les observations.

(a)



(b)



(c)

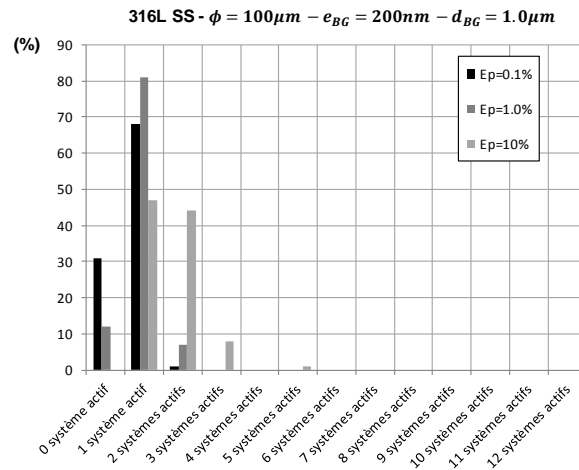


Figure 4.17 Nombre de systèmes activés par grain pour différentes déformations plastiques imposées. Un système, i , est considéré actif lorsque $|\gamma_i^{vp}| > 10^{-4}$.

« Number of active slip systems by grain for different remote plastic strains. A slip system, i , is assumed to be active when $|\gamma_i^{vp}| > 10^{-4}$. »

L'effet de la taille moyenne de grain sur le nombre de systèmes actifs par grain à une déformation plastique $E^p = 1\%$ est présenté à la Figure 4.18. Plus la taille des grains est

petite, plus le nombre de systèmes de glissement actifs est élevé [256]. Cet effet peut être attribué à l'augmentation des contraintes internes lorsque la taille de grains diminue, ce qui facilite l'activation des systèmes secondaires.

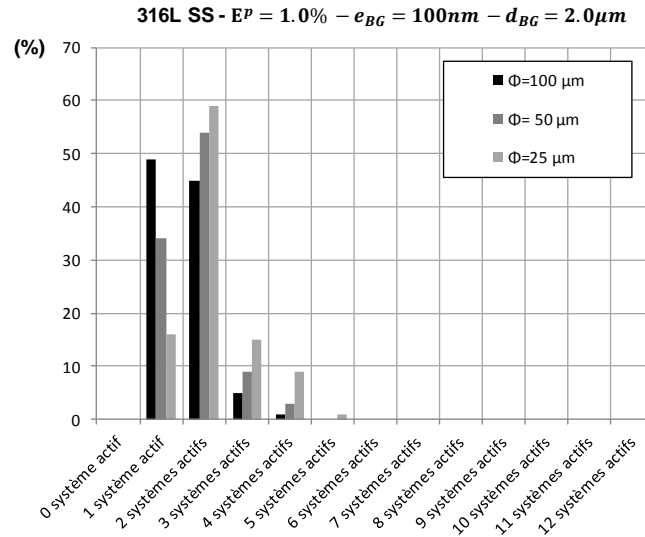


Figure 4.18 Nombre de systèmes activés par grain pour différentes tailles de grain. Un système, i , est considéré actif lorsque $|\gamma_i^{vp}| > 10^{-4}$.

« Number of active slip systems per grain for different mean grain sizes. A slip system, i , is assumed to be active when $|\gamma_i^{vp}| > 10^{-4}$. »

4.3.2.2 Cas des métaux à d_{BG} variable

Dans le cas de l'aluminium et du cuivre, le nombre de bandes augmente linéairement avec la déformation plastique [281,283]. Sur la Figure 4.19, les courbes de traction prédites par le modèle sont comparées aux courbes expérimentales à température ambiante pour l'aluminium ($\phi = 170 \mu m$) [256] et le cuivre ($\phi = 130 \mu m$) [252]. Le modèle prédit bien la courbe de traction du cuivre, mais surestime le comportement en traction de l'aluminium.

Toutefois, pour ces matériaux dans lesquels les bandes de glissement se multiplient en fonction de la déformation plastique, une courbe moins linéaire est prédite en comparaison aux courbes prédites pour le modèle à distance interbande d_{BG} constant (Figure 4.13), ce qui est cohérent avec les observations expérimentales. Cet effet est lié à l'activation plus facile des systèmes secondaires avec le modèle à d_{BG} variable. Pour une même taille de grains, à une déformation plastique de 1%, l'aluminium et le cuivre présentent plus de grains en glissement multiple que l'acier 316L et le laiton Cu30%Zn (Figure 4.18).

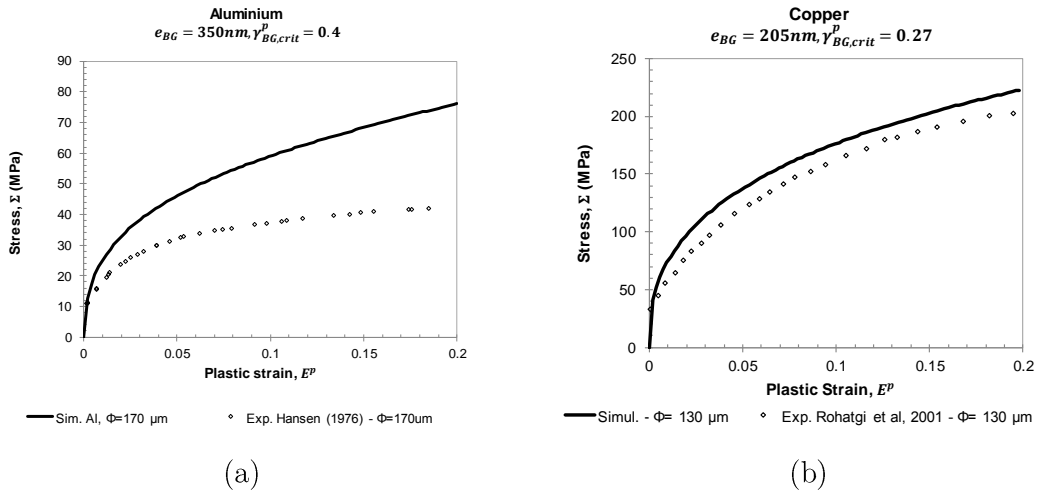


Figure 4.19 Comparaison entre les prédictions du modèle et les données expérimentales pour (a) l'aluminium [256] et le cuivre [252]. Multiplication des bandes ; existence d'une valeur de saturation du glissement par bande, $\gamma_{BG,crit}^p$.

« Comparison between predicted and experimental tensile curves for (a) aluminum [256] and copper [252]. Multiplication of bands defined by a slip saturation value, $\gamma_{BG,crit}^p$. »

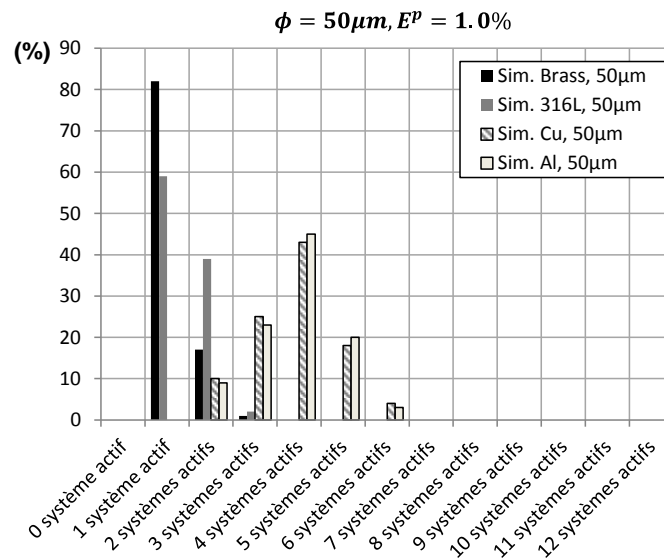


Figure 4.20 Nombre de systèmes activés par grain pour les différents métaux et alliages FCC. Un système, i , est considéré actif lorsque $|\gamma_i^{vp}| > 10^{-4}$.

« Number of active slip systems per grain for different FCC metals and alloys. A slip system, i , is assumed to be active when $|\gamma_i^{vp}| > 10^{-4}$. »

4.3.2.3 Prédiction de l'effet Hall-Petch

Dans les modèles à BG proposés, la taille moyenne de grains affecte d'une part le taux de production de dislocations (Équation 4.8) et les contraintes internes en lien avec la longueur des bandes (Équation 4.13 et Équation 4.19). Le coefficient de Hall-Petch est calculé pour différents matériaux FCC à $E = 0.2\%$, en utilisant cinq tailles moyenne de grains

différentes, entre $5 \mu m$ et $100 \mu m$, et comparé aux valeurs expérimentales issues de la littérature sur la Figure 4.21.

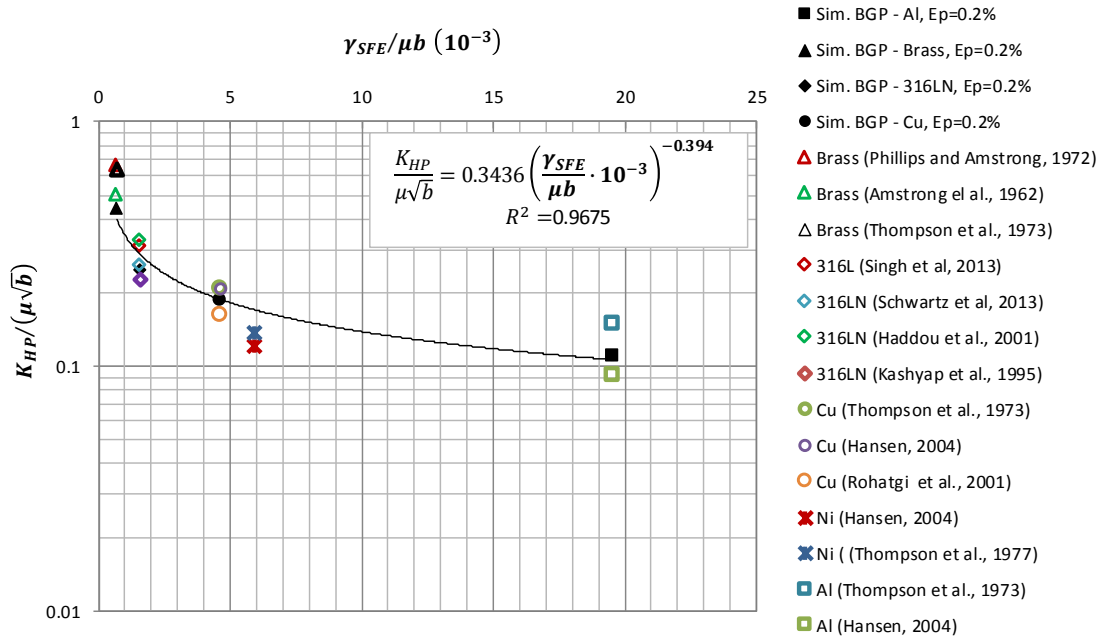


Figure 4.21 Coefficient de Hall-Petch normalisé en fonction de l'énergie de faute d'empilement normalisée. Comparaison entre les valeurs calculées par le modèle et les données expérimentales issues de [252,259,260,262,302-307]. Courbe de tendance de type puissance avec les prédictions du modèle. Coefficient basé sur le calcul de $\Sigma_{p0.2\%}$.

« Normalized Hall-Petch coefficient as a function of the normalized stacking fault energy. Comparison between the calculated values and the experimental data from [252,259,260,262,302-307]. Power trend line with the model predictions. The coefficient is computed based on $\Sigma_{p0.2\%}$ »

Les modèles proposés reproduisent qualitativement l'effet de l'énergie de faute d'empilement sur le coefficient de Hall-Petch observé expérimentalement (Figure 4.23). Cette évolution n'est pas reproduite avec les modèles de transition d'échelle « conventionnels » utilisés précédemment (Figure 4.23). En effet, aucune information sur les caractéristiques de la localisation du glissement n'est prise en compte dans les modélisations fondées sur le schéma d'un grain se déformant plastiquement dans son ensemble.

Il est observé expérimentalement que la taille de grain n'affecte pas de façon significative la pente d'érouissage des polycristaux CFC [256,304,307] (Figure 4.22c,d), sauf dans le cas des très petits grains [253,306] (Figure 4.22c). Toutefois, l'application de ce type de modèle résulte dans une différence importante entre la pente d'érouissage des polycristaux à petites et grandes tailles de grains. Ce comportement peut être observé par l'augmentation de la constante de Hall-Petch, mesurée sur différents niveaux de déformation (Figure 4.22a,b).

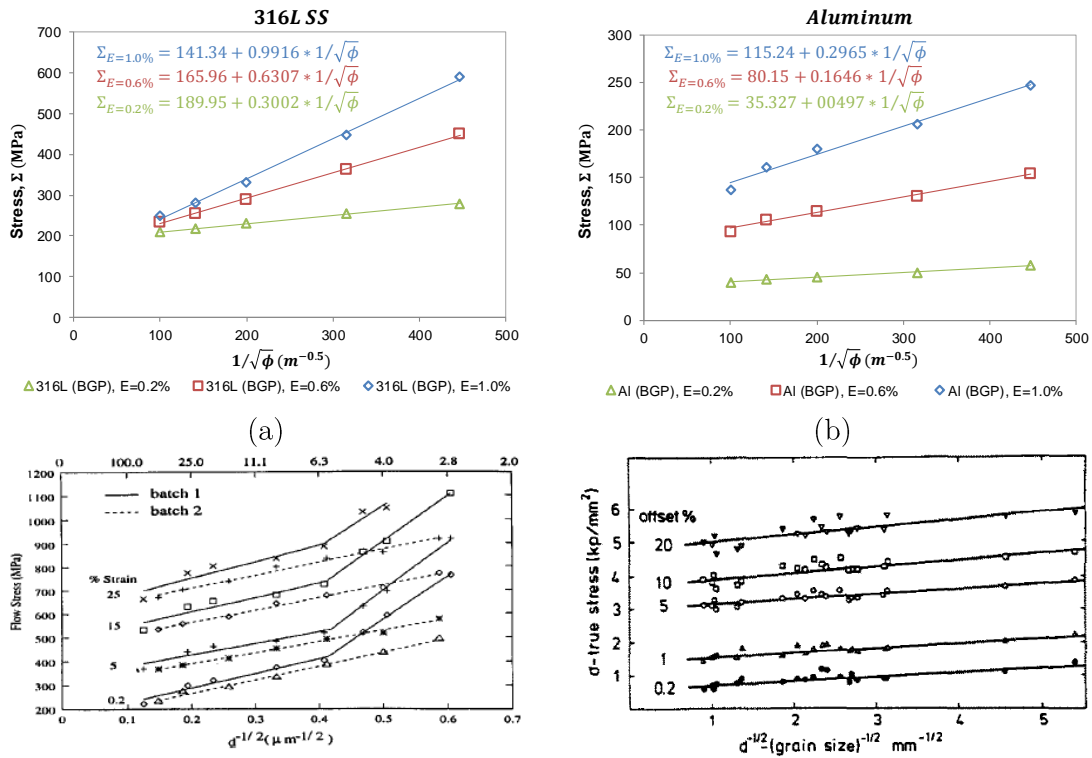


Figure 4.22 Évolution de la contrainte d'écoulement en fonction de la taille de grain pour différents niveaux de déformation. Courbes calculées pour (a) l'acier 316L et (b) l'aluminium. Courbes expérimentales obtenues pour (c) deux nuances d'acier 316L [306] et (d) l'aluminium [256].

« Evolution of flow stress with mean grain size for different remote strain. Calculated curves: (a) 316L SS and (b) Aluminum. Experimental curves : (c) two different 316L SS [306] and (d) Aluminum[256]. »

Bien que les modèles polycristallins avec bandes de glissement semblent être capables de mieux décrire la nature du glissement dans les polycristaux CFC, une étude plus approfondie des caractéristiques physiques des bandes de glissement de chaque matériau doit être effectuée. D'une part, les prédictions du modèle doivent également être validées par rapport aux calculs par éléments-finis à champs complets, concernant la validité des lois de localisation (Équation 4.13 et Équation 4.19). Pour ce type de validation, des calculs ont été récemment effectués par Sicaud [322] (Figure 4.24). D'autre part, il est aussi envisagé de valider les prédictions macroscopiques des différents métaux CFC par rapport à des essais expérimentaux.

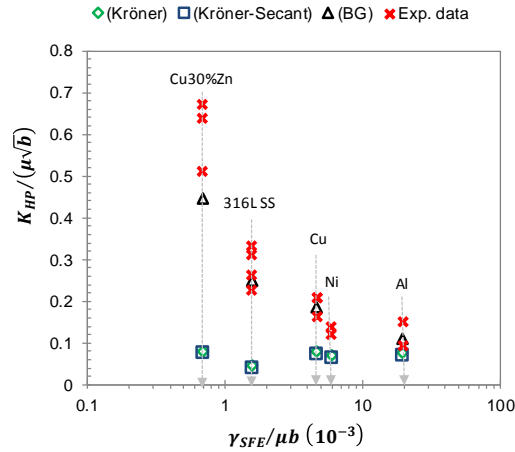


Figure 4.23 Evolution du coefficient de Hall-Petch ($\Sigma_{p0.2\%}$) avec l'énergie de faute d'empilement normalisée. Comparaison des résultats du modèle BG à ceux des modèles à champ-moyens Kröner et Kröner-Secant et les mesures expérimentales issues de [252,259,260,262,302–307].

« Evolution of the Hall-Petch coefficient ($\Sigma_{p0.2\%}$) with the normalized stacking fault energy. Comparison of the results of the BG model with those of Kröner and Kröner-Secant mean-field models and experimental measurements from [252,259,260,262,302–307]. »

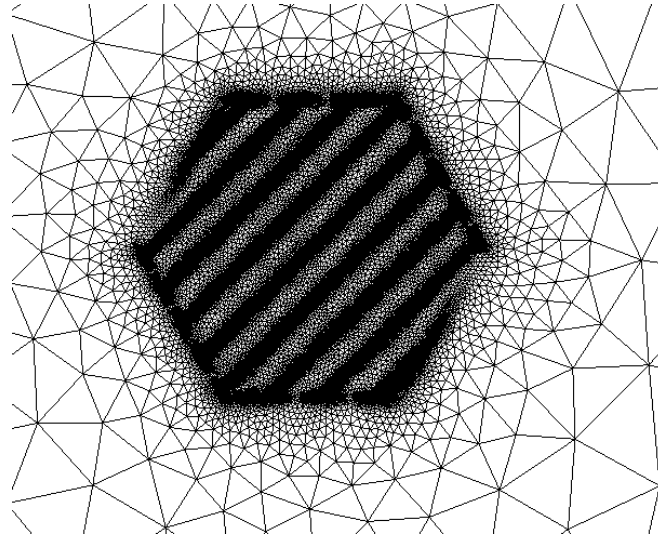


Figure 4.24 Maillage pour validation de la loi de localisation grâce à des calculs d'éléments-finis à champs complets. Grain avec un nombre fixe de bandes. Maillage développé par Sicaud [322].

« Mesh for validation of the localization rule by comparison to the results of the full-field finite-element method. Grain with a fixed number of bands. Mesh developed by Sicaud [322]. »

4.4 Conclusion

Dans la première partie de ce chapitre, nous avons proposé une amélioration des lois de production de dislocations pour les métaux et alliages CFC, visant à éliminer la partition du triangle standard entre les grains en glissement simple et ceux en glissement multiple. Cette proposition est fondée sur un modèle développé par Kubin et al [10] qui additionne les contributions des différentes interactions entre les systèmes de glissement pour calculer

l'incrément des densités de dislocations dans chaque cristal. Les paramètres correspondant à chaque type d'interaction ($K_{jonction}$, K_{copla} et K_{self}) ont été identifiés pour l'acier 316L(N) et pour d'autres métaux CFC à partir d'essais de traction sur des monocristaux. Il est montré que les coefficients K_{copla} et K_{self} sont dépendants de l'énergie de faute d'empilement normalisée. Ce modèle, dit additif, permet de bien rendre en compte la partition du triangle standard et de prédire le comportement cyclique de l'acier 316L(N) à température ambiante pour des chargements uniaxiaux et biaxiaux.

Dans une deuxième partie, des modèles de transition d'échelle basés sur la description de la localisation de la déformation plastique dans les bandes glissement, très souvent observées à la surface des grains, ont été proposés. Ces modèles prédisent un faible nombre de systèmes activés dans les grains des polycristaux CFC à tendance planaire, jusqu'à une déformation plastique élevée ($E^p = 10\%$). Ils permettent également de mieux rendre compte de l'effet de taille de grains et de la linéarité de la pente de durcissement à température ambiante de l'acier 316L(N) et de métaux et alliages CFC, couvrant un large domaine d'énergie de faute d'empilement.

Dans le dernier chapitre, consacré à l'étude du comportement de l'acier 316L(N) à température élevée, le modèle additif proposé dans ce chapitre sera mis à profit pour décrire le comportement cyclique de l'acier 316L(N) à température élevée. Compte-tenu de l'activation plus précoce du glissement dévié à température élevée, le modèle de localisation de la déformation plastique dans les bandes de glissement est moins adapté, bien que des bandes de glissement aient été observés en déformation monotone et cycliques à température élevée. Les modèles à champ moyen de Kröner et Kröner-Sécant présentés précédemment lui seront préférés.

In the first part of this chapter, we proposed an improvement in the crystalline constitutive laws used on the prediction of the macroscopic behavior of 316L(N) SS and other FCC metals and alloys at room temperature. Notably, it was proposed to eliminate the partition of the standard triangle between grains oriented for single slip and multiple slip. The dislocation production rate law developed by Kubin et al [37] was incorporated. This law is composed by the sum of the contribution of different interactions observed between the systems. The parameters corresponding to each most typical interaction ($K_{jonction}$, K_{copla} and K_{self}) were adjusted for the 316L(N) SS and also for other FCC metals, using single crystals tensile curves. The temperature effect was also investigated. This model, named "additive model", allowed us to automatically predict the partition of the standard triangle and to rather accurately predict the cyclic behavior of 316L(N) SS at room temperature for uniaxial and biaxial loadings.

In a second part, scale transition rules, based on the localization of the plastic strain in slip bands, were proposed. These models allowed us to more accurately predict the low number

of activated slip systems observed in planar FCC polycrystals, up to a high plastic strain ($E^p = 10\%$). These models also better accounted for the grain size effect and the linear hardening behavior observed on the tensile curves of different FCC metals at room temperature.

In the following, the “additive model”, proposed in this chapter, will be used for predicting the macroscopic behavior of 316L(N) SS at high temperature, avoiding then the partition of the standard triangle. Given the easier activation of cross-slip at high temperature, the polycrystal model based on slip bands is less suitable, although slip bands have been observed in monotonic and cyclic deformation at high temperatures. The mean-field models of Kröner and Kröner-Secant presented previously will be applied in this case.

5 Modélisation du comportement élasto-viscoplastique de l'acier 316L(N) à haute température

Lorsque l'acier 316L(N) est soumis à des chargements à température élevée, entre 723K et 923K, des mécanismes physiques thermiquement activés, tels que le vieillissement dynamique et la montée des dislocations, jouent un rôle important sur le comportement du matériau. Il est également observé l'apparition d'une structure hétérogène de dislocations, qui induit un très fort durcissement cyclique du matériau. Sur la base du modèle polycristallin à densités des dislocations validé à température ambiante, nous proposons d'introduire certains mécanismes observés à haute température. L'objectif de construire un modèle nécessitant un faible nombre de paramètres ajustables est conservé. La procédure d'identification des paramètres repose, comme à température ambiante, sur des courbes de traction à différentes vitesses de chargement et températures. Le modèle proposé est validé par comparaison sur de nombreux résultats expérimentaux : relaxation, fatigue, fatigue-relaxation, et déformation progressive en traction-torsion. Les prédictions du modèle sont en bon accord avec les données expérimentales obtenues sur l'acier 316L(N) à différentes températures et amplitudes de chargement.

At temperatures between 723K and 923K, thermally activated physical mechanisms, such as dynamic strain aging and dislocation climb, play an important role in the mechanical behavior of 316L(N) SS. In this range of temperature, a more heterogeneous and well-defined dislocation structure is much quickly observed during cyclic loading, inducing in a very strong cyclic hardening. Based on the polycrystalline model validated at room temperature, we propose in this chapter to introduce the physical mechanisms observed at high temperatures. As the model proposed in Chapter 3, the model proposed in this part presents a small number of adjustable parameters. The parameter inversal identification procedure uses on tensile curves at different strain rates and temperatures. The proposed model is validated on numerous experimental tests: relaxation, fatigue, fatigue-relaxation, and progressive deformation in traction-torsion. The model predictions are in good agreement with the experimental data obtained on 316L (N) steel at different temperatures and loading amplitudes.

5.1 Introduction

L'objectif de ce chapitre est de présenter le développement et la validation du modèle polycristallin pour la déformation des aciers inoxydables austénitiques, en particulier de l'acier 316L(N), dans un domaine de température élevée, entre 723K et 923K. Le modèle polycristallin proposé tient compte des mécanismes physiques de la déformation viscoplastique décrits au Chapitre 1 (vieillessement dynamique, montée des dislocations, etc.) et rappelés et décrits en détail dans la Section 5.2 de ce chapitre.

Sur la base du modèle élasto-viscoplastique à température ambiante présenté au Chapitre 3, il est envisagé un nombre des paramètres ajustables le plus faible possible, afin de conserver le caractère prédictif du modèle. L'avantage de ce type de modèle est de décrire les mécanismes de déformation dans un large domaine de validité, y compris pour des chargements avec de longs temps de maintien et de faibles déformations, difficilement accessibles expérimentalement.

La première partie de ce chapitre, Section 5.2, est consacré à la description de la modélisation des mécanismes physiques thermiquement activés, tel que le vieillissement dynamique (DSA) et la restauration par montée des dislocations. Nous présentons également les équations permettant la prise en compte des structures de dislocations. L'ensemble des équations du modèle est rappelé dans la Section 5.3. La démarche d'identification de paramètres est abordée dans la Section 5.4. Dans la Section 5.6, nous présentons la validation du modèle par comparaison à des différents essais à température élevée issus de la littérature. Enfin, une étude de sensibilité par rapport à certains paramètres matériaux est présentée dans la Section 5.6.

5.2 Développement du modèle à température élevée

5.2.1 Le vieillissement dynamique

Un fort écrouissage cyclique est observé en fatigue aux températures élevées. Ce durcissement peut être attribué en partie au vieillissement dynamique (DSA - *dynamic strain ageing*). Dans le domaine de température intermédiaire (de 523 à 723K), le DSA lié à la diffusion des atomes interstitiels (C, N) favorise le glissement planaire pouvant conduire à l'apparition des structures de Corduroy, au caractère très durcissant [63,140]. Dans le domaine de température élevée (entre 723 K et 873 K), le vieillissement dynamique, attribué à la diffusion des atomes substitutionnels (Cr, Ni), favorise la formation de structures hétérogènes dipolaires contribuant au durcissement cyclique [35,141,244].

Plusieurs modèles théoriques ont été proposés [237,324,325] afin de décrire l'interaction entre un atome d'impureté et une dislocation. Une revue de ces modèles a été récemment proposée par Rachdi [153]. Toutefois, dans ce travail on s'orientera vers des modèles

permettant de décrire le durcissement du matériau par la formation d'atmosphères de solutés liées à la diffusion des atomes de Chrome.

Le mécanisme du DSA par la formation d'atmosphères de solutés est schématisé sur la Figure 5.1. Lorsqu'une dislocation mobile rencontre un obstacle durant son déplacement (obstacle de type « arbre de la forêt »), elle reste temporairement bloquée pendant une durée d'attente appelée t_w (« w » pour « waiting ») avant d'être capable de franchir l'obstacle. Durant cette phase d'attente, les conditions d'ancrage de la dislocation peuvent être modifiées. Des atomes de solutés diffusent vers le point d'ancrage, en créant une atmosphère de solutés au tour de cette intersection de dislocations. Une durée de vieillissement, t_a (« a » pour « ageing »), est associée au processus de diffusion des atomes de soluté vers les points d'ancrage des dislocations mobiles [53]. Plus la durée de vieillissement est importante plus la concentration en éléments ségrégués augmente.

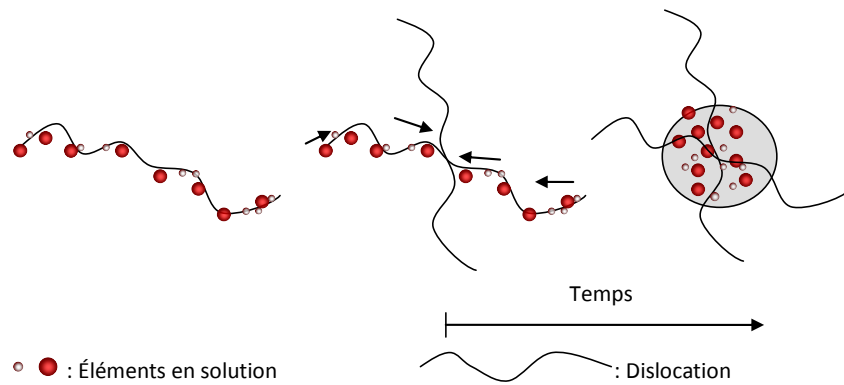


Figure 5.1 Mécanisme simplifié du vieillissement dynamique, au niveau des jonctions attractives entre dislocations [3].

« Simplified mechanism of dynamic aging, occurring at attractive junctions between dislocations [3]. »

L'expression de la concentration effective des atomes de soluté autour de la dislocation, C_{sol} , a été proposé par Estrin, Kubin et McComick [326,327], en prenant en compte la saturation en atomes de soluté :

$$C_{sol} = C_{sat} \left(1 - \exp \left(- \frac{t_a}{\delta_0} \right)^{\frac{2}{3}} \right) \quad \text{Équation 5.1}$$

où C_{sat} est définie comme la concentration de solutés à saturation. Selon Louat [328], la concentration à saturation varie avec la température. Toutefois, un seuil de la concentration à saturation égal à 53% [153] sera appliqué dans la suite de ce travail. δ_0 est un temps caractéristique associé à la diffusion. Selon Friedel [237], δ_0 peut s'exprimer par :

$$\delta_0 = \left(\frac{C_{sat}}{C_0} \right)^{\frac{2}{3}} \frac{\kappa_B T b^2}{3 \cdot U_{cr} \cdot D^{Cr}} \quad \text{Équation 5.2}$$

Où κ_B est la constante de Boltzmann, R est la constante des gaz parfaits et T est la température. La concentration de soluté dans la matrice est notée C_0 . L'énergie d'interaction entre une dislocation et un atome de soluté de Chrome est noté par U_{cr} .

La valeur du coefficient de diffusion, D^{Cr} , pour le cas du Chrome, peut être déterminée à l'aide de l'expression [329] :

$$D^{Cr} = D_o^{Cr} \cdot \exp\left(-\frac{Q_Y^{Cr}}{RT}\right) \quad \text{Équation 5.3}$$

La concentration en solutés ségrégués autour des dislocations passe par un régime transitoire avant de se stabiliser. Afin de prendre en compte le fait que le temps de vieillissement peut être plus grand que le temps d'attente dans certaines situations, McCormick [327] propose une équation phénoménologique pour décrire ce processus :

$$t_a = 1 - t_a/t_w \quad \text{Équation 5.4}$$

Dans le cas où le mécanisme du DSA est actif, la vitesse moyenne de la dislocation, \bar{v} , s'exprime sous la forme :

$$\bar{v} = \bar{\lambda}/t_w \quad \text{Équation 5.5}$$

Les dislocations mobiles étant ancrées par les obstacles de type arbre de la forêt, la distance moyenne balayée par une dislocation entre deux phases d'attente, $\bar{\lambda}$, peut s'exprimer en fonction de la densité de dislocations : $\bar{\lambda} = 1/\sqrt{\rho_t}$.

À l'aide de l'équation d'Orowan, $\dot{\gamma}^{vp} = b\rho_m\bar{v}$, où $\dot{\gamma}^{vp}$ est la vitesse du glissement viscoplastique et ρ_m la densité des dislocations mobiles, la durée d'attente s'exprime par :

$$t_w = \frac{(\rho_e^i + \rho_s^i) \cdot b}{|\dot{\gamma}_{i,e}^{vp} + \dot{\gamma}_{i,s}^{vp}| \cdot \sqrt{\rho_t}} \quad \text{Équation 5.6}$$

Dans le cas de l'acier 316L(N), le chrome semble être l'élément plus important dans le processus de sensibilité inverse à la vitesse [62]. En effet, comme discuté dans le Chapitre 1, l'énergie d'activation associée à l'apparition d'instabilités sur une courbe de traction pour l'acier 316L(N) dans la gamme de température entre 773-873 K est du même ordre que l'énergie de diffusion du chrome dans l'austénite [55,62]. L'évolution de ρ_0 en fonction de la température est présentée sur la Figure 5.2.

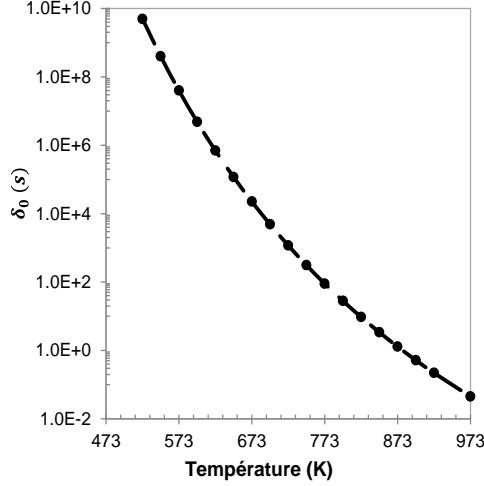


Figure 5.2 Évolution du temps caractéristique associé à la diffusion du Chrome, δ_0 , en fonction de la température.

« Evolution of the characteristic time associated to Chrome diffusion, δ_0 , as a function of temperature. »

Dans ce travail on considère que tout le Chrome est en solution solide, c'est-à-dire $C_0 \cong 0,17$. L'énergie de diffusion du Chrome, Q_{γ}^{Cr} , est égal à 243 kJ.mol⁻¹, et le coefficient de diffusion, D_o^{Cr} est égal à 8.10⁻⁶ m².s⁻¹ [330]. L'énergie d'interaction entre une dislocation et un atome de soluté de Chrome, U_{cr} , est égal à 0.4 eV [57]. Les valeurs de δ_0 dans la gamme 773-873 K sont comprises entre 90,2 s et 1,30 s.

La Figure 5.3a présente l'évolution de concentrations en éléments ségrégués, C_{sol} en fonction de la vitesse de déformation à différentes températures. On considère $\dot{\gamma}^{vp} = M \cdot \dot{E}^{vp}$ avec $M = 3,06$ (facteur de Taylor pour les métaux CFCs isotropes), $t_w \approx t_a$, $\rho_m = 10^{11} m^{-2}$ et $\rho_{tot} = 10^{14} m^{-2}$. Pour des faibles vitesses de déformation, les éléments en solution ont le temps de se diffuser vers les jonctions entre dislocations. Dans ce cas, on observe une saturation de la concentration de solutés. Lorsque la vitesse augmente, les éléments en solution ont moins de temps pour ségréger aux jonctions et la concentration d'atomes de soluté diminue. Aux vitesses plus élevées, les solutés n'ont pas le temps de ségréger, et la concentration autour des jonctions est nulle. Les vitesses de déformation caractérisant l'intervalle de transition varient selon la température.

Sur la Figure 5.3b, on compare les vitesses de la phase transitoire observées sur la Figure 5.3a avec le domaine expérimental où le DSA est actif, caractérisé par la présence de serrations sur les courbes de traction [70]. On observe un bon accord entre le domaine d'apparition du DSA calculé et celui mesuré expérimentalement.

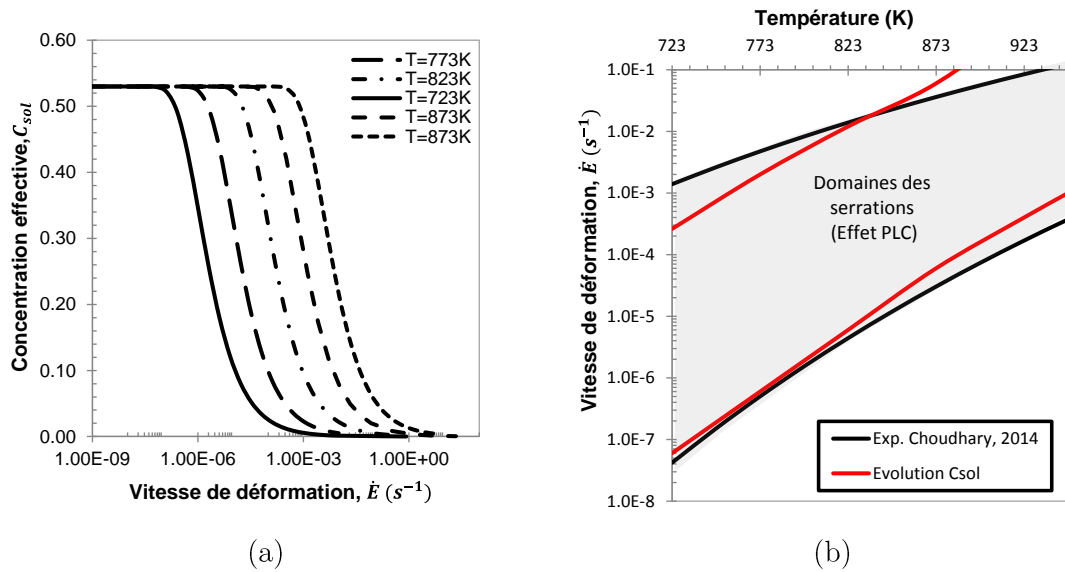


Figure 5.3 (a) Évolution de la concentration en éléments ségrégués au niveau des jonctions en fonction de la vitesse de déformation à différentes températures. (b) Comparaison entre l'intervalle de variation de C_{sol} et celui d'apparition de serrations, mesuré expérimentalement par [70].

« (a) Evolution of the segregated elements concentration as a function of the strain rate at different temperatures. (b) Comparison between the interval where C_{sol} varies and that one where stress-strain serrations are observed experimentally [70]. »

Le durcissement dû au vieillissement dynamique est introduit sous la forme d'une contrainte critique, permettant de décrire la sensibilité de la contrainte à la vitesse de chargement.

Mulford et Kocks [331] considèrent que le DSA affecte la contrainte par l'amplification de l'écroutissage de type arbre de la forêt, selon l'équation :

$$\tau_{c,i} = (1 + f_{DSA} \cdot C_{sol}) \cdot \mu b \sqrt{\sum_{j=1}^{12} h_{ij} \rho^j} \quad \text{Équation 5.7}$$

Où f_{DSA} est un facteur empirique permettant de décrire l'interaction de type dislocation-soluté. Cette hypothèse a été appliquée dans le modèle hybride proposé par Gentet [3]. Avec ce modèle, Gentet [3] obtient une bonne description de la sensibilité de la contrainte à la vitesse de déformation.

Van den Beukel [331] considère que le DSA affecte la contrainte critique par la diminution de l'espacement des obstacles le long des dislocations. Il en résulte l'apparition d'une contrainte, τ_{DSA} , qui représente le durcissement additif du DSA, lié à l'ancrage des dislocations par la formation d'atmosphères des solutés. La contrainte critique s'écrit sous la forme :

$$\tau_{c,i} = \mu b \sqrt{\sum_{j=1}^{12} h_{ij} \rho^j} + \tau_{DSA} \quad \text{Équation 5.8}$$

Le modèle proposé par Van den Beukel [331] sera retenu dans ce travail. La contrainte critique liée au DSA peut être reliée à la concentration de soluté par une équation du type [324,31] :

$$\tau_{DSA} = f_{DSA} \cdot \mu \cdot C_{sol} \quad \text{Équation 5.9}$$

Pour des interactions dislocation-soluté fortes, comme dans le cas du Fer-Chrome [153], Mott [324] propose une formule empirique où le facteur d'interaction, f_{DSA} , s'exprime sous la forme :

$$f_{DSA} \cong 0,136 \epsilon_a^{4/3} \quad \text{Équation 5.10}$$

Où ϵ_a est le facteur de taille entre le rayon de l'atome de soluté et celui de la matrice (a_0) : $\epsilon_a = \Delta a / a_0$. Le Tableau 5.1 rassemble des valeurs des rayons atomiques mesurés pour le Fer et le Chrome, issues de la littérature, et la valeur du facteur f_{DSA} théorique correspondante. La formule de Mott donne un ordre de grandeur du facteur f_{DSA} . Toutefois, cette équation établie pour des interactions statiques entre solutés et dislocations doit être utilisée avec précaution. Dans notre étude, le facteur f_{DSA} sera considéré comme un paramètre ajustable.

Tableau 5.1 Rayons atomiques mesurés pour le Fer et le Chrome et valeur du facteur f_{DSA} théorique correspondante.

« Atomic radii measured for Iron and Chromium and value of the corresponding f_{DSA} factor »

a_{Fer}	a_{Chrome}	f_{DSA}	Ref
1.24 Å	1.25 Å	0.0002	[332]
1.26 Å	1.29 Å	0.0009	[333]
1.56 Å	1.66 Å	0.0035	[334]

5.2.2 Prise en compte du glissement dévié et production de boucles prismatiques

Dans le cas de l'acier 316L(N), l'énergie de faute d'empilement augmente avec la température (Figure 5.4) et, par conséquent, l'activation du glissement dévié est facilitée [297,299,300]. De plus, le glissement dévié étant un mécanisme thermiquement activé, sa probabilité d'activation augmente fortement avec la température [34]. Parallèlement, il en résulte une augmentation de la distance critique d'annihilation des dislocations vis (cf. Section 0).

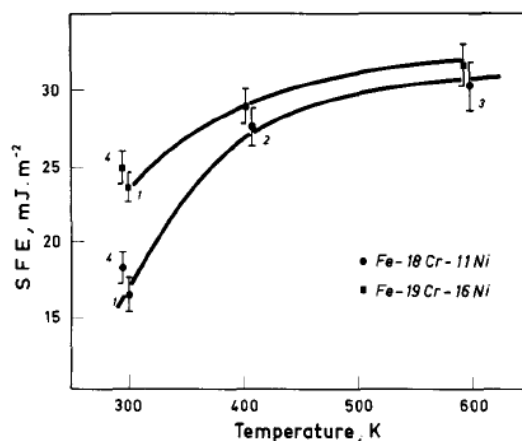


Figure 5.4 Évolution de l'énergie de faute d'empilement en fonction de la température pour deux nuances d'acier inoxydable austénitiques: Fe-18.3Cr-11Ni-0.005C et Fe-18.3Cr-16Ni-0.005C [299]

« Stacking fault energy as a function of temperature for two austenitic stainless steels: Fe-18.3Cr-11Ni-0.005C and Fe-18.3Cr-16Ni-0.005C [298] »

Lors de la déformation plastique, le glissement dévié a deux rôles majeurs et concurrents. Dans un premier temps, le glissement dévié favorise l'annihilation des dislocations vis responsable de la restauration dynamique au Stade III de la courbe contrainte-déformation des monocristaux [45,79]. Dans ce rôle, le glissement dévié peut réduire le taux de production des dislocations lorsqu'un cristal est déformé plastiquement. Dans un second temps, le glissement dévié tend à augmenter le taux de production de dislocations, par la création de structures de dislocations, telles que des boucles prismatiques, en provoquant le durcissement du matériau [27,335,336]. De plus, le glissement dévié favorise le développement d'une microstructure de dislocations bien définie [28]

Les boucles prismatiques sont des débris de dislocations persistants, jouant un rôle important dans le processus d'apparition des microstructures de dislocations des métaux CFC lors des chargements monotones et cycliques [337-339]. Plusieurs mécanismes de formation ont été proposés dans la littérature pour expliquer la formation des boucles prismatique. Ces mécanismes peuvent être distingués en deux grandes classes, impliquant la montée de dislocations et le glissement des dislocations [338]. Nous ne considérerons que les mécanismes de formation assistée par le glissement.

Les boucles prismatiques peuvent être formées par deux dislocations opposées glissant sur des plans de glissement parallèles. Les parties de vis de deux dislocations glissent l'une vers l'autre, comme illustré à la Figure 5.5. Si les plans de glissement dévié sont décalés entre eux, une double annihilation assistée par le glissement dévié résulte dans la formation d'une boucle [338,340]. Ces structures ont été observées dans plusieurs métaux CFC, tel que l'aluminium [339], le nickel [229], le cuivre [341] et l'acier 316L(N) [342]. Plus récemment, des simulations en dynamique des dislocations discrètes [338,343] et en dynamique

moléculaire [344] ont permis de mettre en évidence les mécanismes de formation des boucles prismatiques produites par la déformation des cristaux CFC.

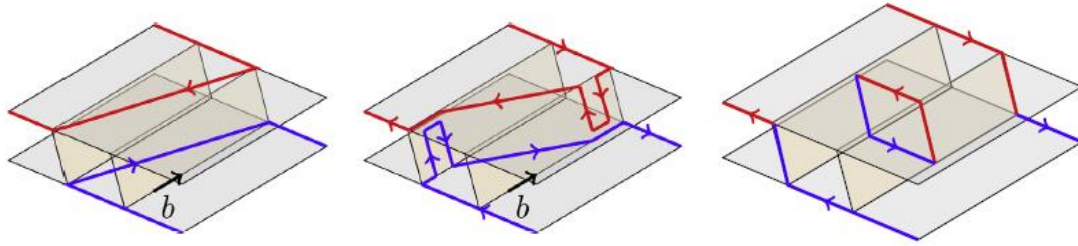


Figure 5.5 Mécanisme de création de boucles prismatiques : deux dislocations glissent sur deux plans parallèles et forment une boucle après annihilation par le glissement dévié [338].

« Mechanism of prismatic loops creation: two dislocations slide on two parallel planes, forming a loop after cross-slip annihilation [338]. »

La longueur maximale des boucles prismatiques est définie par la distance d'annihilation des dislocations vis, caractérisant le glissement dévié [235]. Pour des distances supérieures, aucune interaction entre les dislocations de signe opposée n'est observée, et deux dislocations vis continuent à glisser. Le largueur des boucles est limité par la distance d'annihilation des dislocations coins. En effet, si une dislocation coin glisse entre les deux limites de la boucle prismatique, l'annihilation spontanée de la boucle prismatique est observée. Ces mécanismes peuvent s'écrire par :

$$\dot{\rho}_{PL}^i = 2\rho_s^i \cdot \frac{y_s - y_e}{b} \cdot |\dot{\gamma}_s^i| - \frac{2y_e}{b} \cdot \rho_{PL}^i \cdot |\dot{\gamma}_e^i| \quad \text{Équation 5.11}$$

L'intensification du glissement dévié, caractérisé par l'augmentation de y_s , favorise l'apparition des boucles prismatiques dans l'acier 316L(N) aux températures plus élevées.

L'apparition des nombreuses boucles prismatiques contribue au développement d'une structure de dislocations bien définie, conduit également à une plus forte irréversibilité du glissement lors des chargements cycliques à température élevée. Comme cela a été montré par Mughrabi [232,345], l'irréversibilité du mouvement des dislocations est fortement affecté par le glissement dévié.

5.2.3 Développement plus simple des microstructures de dislocations

Dans le cas de l'acier 316L(N) à température élevée, le fort durcissement cyclique observé est concomitant à la formation d'une structure de dislocations bien définie, composé principalement par des cellules de dislocations. En effet, l'activation plus facile du glissement dévié favorise la formation d'une structure de type mur-chenaux après quelques cycles, même à une amplitude de déformation plus faible [64].

Cette structure est caractérisée par une distribution hétérogène de dislocations dans le grain, composant une phase « dure », contenant une densité de dislocations élevée, et une

phase « molle », de faible densité de dislocations. Des observations en MET montrent que la phase « dure » est composée principalement par des dipôles-coins et des boucles prismatiques [40,45,229,244].

Dans le cadre de cette étude, l'apparition de cette microstructure de dislocations bien définie est modélisée en utilisant le principe de similitude. Le principe de similitude est une relation empirique basée sur un très grand nombre de mesures expérimentales des structures de dislocations des métaux CFC. Cette relation traduit le fait que la longueur caractéristique des structures de dislocations est inversement proportionnelle à la contrainte [45] :

$$\tau = K_{sim} \frac{\mu b}{d_{cell}} \quad \text{Équation 5.12}$$

Où d_{cell} est la taille moyenne de la structure de dislocations considérée, définie par la somme du diamètre de la phase molle (d_c) et des deux moitiés de l'épaisseur de la phase dure (d_w) (Figure 5.6) [45] et K_{sim} le coefficient de similitude. La forme très simple de la relation de similitude implique que son origine est liée aux champs de contraintes élastiques autour des dislocations. Cette relation est indépendante de la température, avec la même contrainte adimensionnée, K_{sim}^c [45].

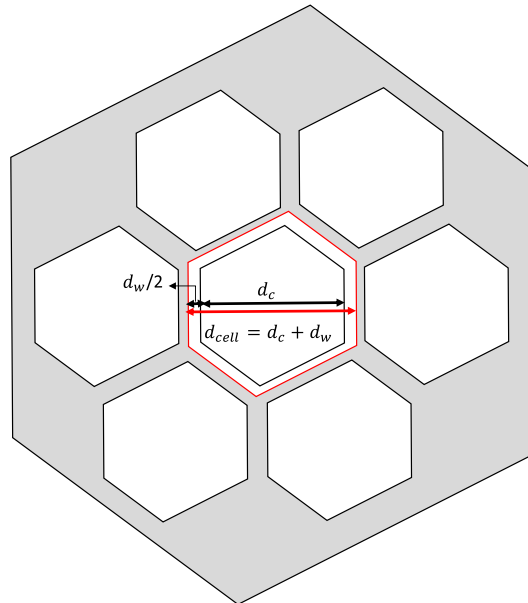


Figure 5.6 Schéma des cellules de dislocations dans un grain. La taille moyenne des cellules, d_{cell} , est définie par la somme du diamètre de la phase molle (d_c) et de l'épaisseur de la phase dure (d_w) [45].

« Schematically view of dislocation cells in a crystal. The mean cell size, d_{cell} , is defined as the sum of the soft phase diameter (d_c) and the thickness of the hard phase (d_w) [45]. »

Prinz et Argon [346] ont vérifié le principe de similitude sur des monocristaux de cuivre orientés selon la direction [001] à 77 K et 293 K. Une étude similaire a été réalisée par Kayali et Plumtree [347] sur des polycristaux d'aluminium. Ces auteurs ont relié la densité de dislocations au coefficient de similitude en utilisant la loi de Taylor, qui caractérise

l'écroissage par les dislocations, $\tau = \bar{\alpha}\mu b\sqrt{\rho}$, où $\bar{\alpha}$ dénote le coefficient de durcissement. Cette relation s'exprime par :

$$\frac{K_{sim}}{\bar{\alpha}} = d_{cell}\sqrt{\rho}. \quad \text{Équation 5.13}$$

Sauzay et Kubin [45] ont effectué une analyse détaillée de la relation de similitude dans le cas de chargements monotones et cycliques. Ces auteurs montrent que les coefficients K_{sim} et α^c sont proportionnels, de sorte que :

$$\frac{K_{sim,monotone}}{\bar{\alpha}_{monotone}} = \frac{K_{sim,cyclique}}{\bar{\alpha}_{cyclique}} = const. \quad \text{Équation 5.14}$$

La Figure 5.7 montre les valeurs de α_{sim} et K_{sim}^c identifiées pour différents matériaux sous chargement cyclique à différentes températures. Les valeurs de α obtenues pour le nickel et le cuivre sous chargement cyclique sont proches, avec $0.122 \leq \bar{\alpha}_{cyclique} \leq 0.136$. La valeur mesurée du coefficient de similitude sur différents métaux CFC varie entre $2.9 \leq K_{sim} \leq 3.4$, avec une valeur $\bar{K}_{sim} = 3.26$, identifiée entre 4 K et 750 K, pour Cu, Ni, Ag et Mg.

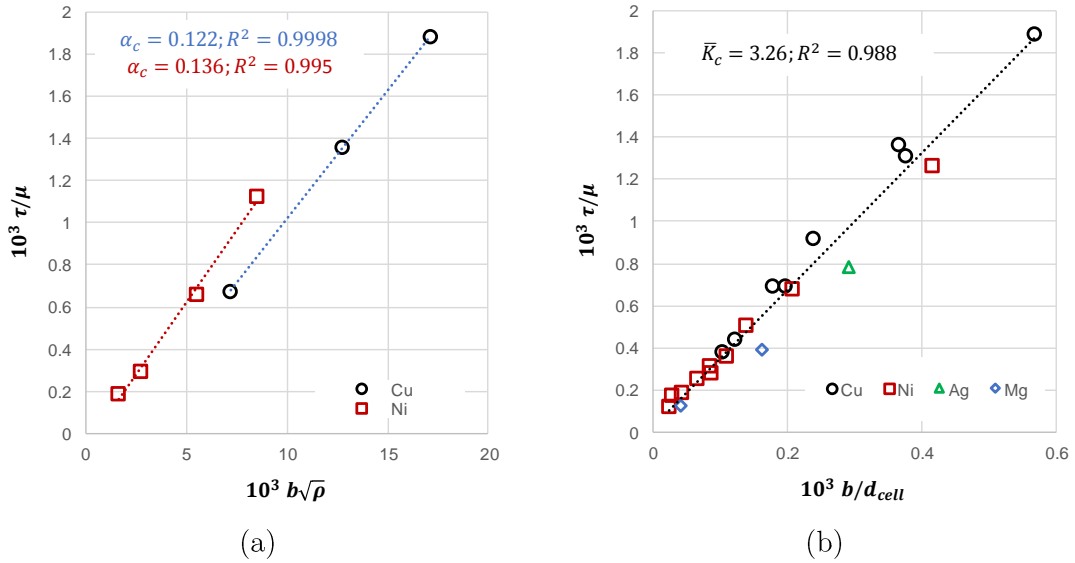


Figure 5.7 (a) Coefficient de durcissement cyclique, $\bar{\alpha}_{cyclique}$, et (b) coefficient de similitude, K_{sim}^c , évalué grâce aux mesures des tailles caractéristiques des structures de dislocations des monocristaux de cuivre, de nickel, magnésium et argent [45].

« (a) Cyclic hardening coefficient, $\bar{\alpha}_{cyclique}$, and (b) similitude coefficient, K_{sim}^c , defined from characteristic sizes of dislocation structures, measured of single crystals of copper, nickel, magnesium and silver [45]. »

Dans le cas d'une structure cellulaire bien définie, une dislocation glissant dans la partie molle sera probablement stoppée par les murs des dislocations composant ces cellules. Les observations expérimentales en TEM *in situ* de Tabata et al. [348,349] montrent que les dislocations s'arrêtent aux murs de dislocations. La densité de dislocations dans les murs est tellement élevée que les dislocations mobiles ne pas capable de les traverser.

Ainsi, le libre parcours moyen des dislocations vis et coins, proposé dans le Chapitre 4, s'exprimera par :

$$L = \min \left(\left(\frac{\sqrt{h_{ij}\rho_i}}{K_{\text{jonction}}} + \frac{\sum_{j \in \text{copla } i} \sqrt{h_{\text{copla}}\rho_i}}{K_{\text{copla}}} + \frac{\sqrt{h_0\rho_i}}{K_{\text{self}}} \right)^{-1}, \phi, d_{\text{cell}} \right) \quad \text{Équation 5.15}$$

Le premier terme exprime la contribution de chaque type d'interaction entre les systèmes de glissement sur le taux de production des dislocations mobiles et le libre parcours moyen. Le deuxième terme représente la taille de grain moyenne et le troisième, la taille moyenne des cellules, exprimée en fonction de la densité totale de dislocations par l'Équation 5.13.

Il est important de noter qu'une quantité minimale des dipôles-coins et de boucles prismatiques est requise pour la formation des structures cellulaires. Dans le cas des monocristaux de nickel sous chargement cyclique, Tippelt et al. [229] ont montré que la densité de dipôles-coins et de boucles prismatiques est beaucoup plus importante que la densité de dislocations mobiles (vis et coins). Un constat similaire est fait par Gentet et al. [244] dans le cas de l'acier 316L(N) déformé cycliquement. Ses observations en MET ont montré que la densité de dislocations composant les murs (ρ_d et ρ_{BP}) est de l'ordre de 1 à 5 fois plus grande que la densité de dislocations dans les phases molles (ρ_e et ρ_s).

Afin d'assurer que les cellules de dislocations ne seront formées que si une densité de dipôles et boucles prismatiques minimale est atteinte, c'est-à-dire $(\rho_d + \rho_{PL}) > (\rho_e + \rho_s)$ selon les observation au MET [3,244], un rapport $(\rho_d + \rho_{PL})/\rho_{\text{tot}} > 0.5$ est appliqué. Toutefois, la détermination d'une valeur précise du rapport $(\rho_d + \rho_{PL})/\rho_{\text{tot}}$ pour définir l'apparition des cellules de dislocation dépend fortement des conditions de chargement (E_a^{vp} , \dot{E} , T) [143]. Dans la section 5.6, nous étudions l'impact de ce seuil sur la prédiction du comportement cyclique.

5.2.4 Montée des dislocations-coins

À température élevée, Tavassoli et al. [152,154] ont observé une diminution de la densité de dislocations pendant le temps de maintien lors d'un essai de fatigue-relaxation sur l'acier 316L(N). Ce phénomène est attribué à l'annihilation des dipôles coins et boucles prismatiques par le mécanisme de montée des dislocations. La montée correspond au déplacement des dislocations coins dans une direction perpendiculaire à leur plan de glissement. La montée est un mécanisme thermiquement activé qui opère à des températures élevées, impliquant la diffusion de défauts ponctuels, aussi appelés lacunes (« v » pour « *vacancies* ») [36,350].

Le taux d'annihilation des dipôles peut être déterminé par :

$$\dot{\rho}_d^{cl} = -\frac{\rho_d}{t_{cl}} \quad \text{Équation 5.16}$$

Où t_{cl} est le temps de montée nécessaire pour que les deux parties d'un dipôle se rapprochent suffisamment pour s'annihiler spontanément. Selon Prinz et al. [36], le temps nécessaire pour que les deux dislocations d'un dipôle-coins, de hauteur h_{max} , s'annihilent par montée est donné par :

$$t_{cl} = \frac{1}{2\sqrt{2}} \int_{h_{min}}^{h_{max}} \frac{dh}{v_{cl}(h)} \quad \text{Équation 5.17}$$

Où v_{cl} est la vitesse de montée des dislocations. Dans le cas des faibles contraintes appliquées, la vitesse de montée se simplifie par [34] :

$$v_{cl} \approx 2\pi c_j \frac{D^{sd} \tau_{cl} b^2}{\kappa_B T} \quad \text{Équation 5.18}$$

D^{sd} est le coefficient d'autodiffusion des lacunes, défini par :

$$D^{sd} = D_0^{sd} \exp\left(\frac{Q^{sd}}{\kappa_B T}\right) \quad \text{Équation 5.19}$$

D_0^{sd} représente le coefficient de diffusivité, lié à la migration des lacunes, et Q^{sd} est l'énergie d'autodiffusion [34]. σ_{cl} est la contrainte appliquée dans le processus de la montée, définie par la somme d'une contrainte macroscopique normale au plan de glissement, σ^{norm} , et d'une contrainte d'interaction élastique entre les deux dislocations du dipôle, σ^{elas} :

$$\sigma_{cl} = \sigma^{norm} + \sigma^{elas} \quad \text{Équation 5.20}$$

La contrainte élastique peut être exprimée par [36] :

$$\sigma^{elas}(h) = \frac{\mu b}{\sqrt{2}\pi(1-\nu)h} \quad \text{Équation 5.21}$$

L'intégration de l'Équation 5.17 conduit à une formulation du temps de montée caractéristique de l'annihilation d'un dipôle de hauteur h . Cette formule s'écrit [153] :

$$t_{cl} = \frac{\kappa_B T(1-\nu)}{4\mu b^3 c_j D^{sd}} r_o^2 \left[H - Y_e + \ln\left(\frac{1+Y_e}{1+H}\right) \right] \quad \text{Équation 5.22}$$

avec $r_o = \frac{\mu b}{\sqrt{2}\pi(1-\nu)\sigma}$, $Y_e = \frac{h_{min}}{r_o}$ $H = \frac{h_{max}}{r_o}$

Rachdi [153] propose à partir de l'Équation 5.17 une formule simplifiée pour calculer le temps de montée avec les hypothèses suivantes :

- les dislocations sont saturées en crans : $c_j = 1$. Cette hypothèse est en accord avec les expériences de recuit après hypertrempe de Seidman et Balluffi [351] :

- la hauteur maximale d'un dipôle (h_{max}) est définie pour un dipôle en équilibre, tel que : $h_{max} = \frac{\mu b}{8\pi(1-\nu)\tau}$
- Le passage de la contrainte macroscopique, Σ , à la contrainte locale à l'échelle du grain, σ^{norm} , est donné par $\sigma^{norm} = \sigma = \Sigma/M$, avec $M = 3,06$ pour un modèle de type Taylor.

Ainsi, le temps de montée s'exprime par :

$$t_{cl} \approx \frac{\mu\kappa_B T M^2}{32\pi^2 D^{sd} b \Sigma^2} \quad \text{Équation 5.23}$$

La Figure 5.8 présente l'évolution du temps de montée en fonction de température évaluée par cette approche simplifiée. Pour cette application, on considère une valeur de la contrainte macroscopique de l'ordre de 300 MPa. Les paramètres physiques liés à l'autodiffusion des lacunes sont $D_0^{sd} = 5.10^{-5} m^2.s^{-1}$ et $Q_f^v = 264 kJ.mol^{-1}$ [352]. A titre de comparaison, nous avons représenté la valeur critique du temps de maintien pour éviter l'apparition des microstructures de dislocations au cours d'un essai de fatigue-relaxation. Ce temps de maintien critique, t_h , a été mesuré pour l'acier 316L(N) à 773 K [153], 823 K [137] et 873 K [154], pour une déformation cyclique $E = \pm 0.3\%$.

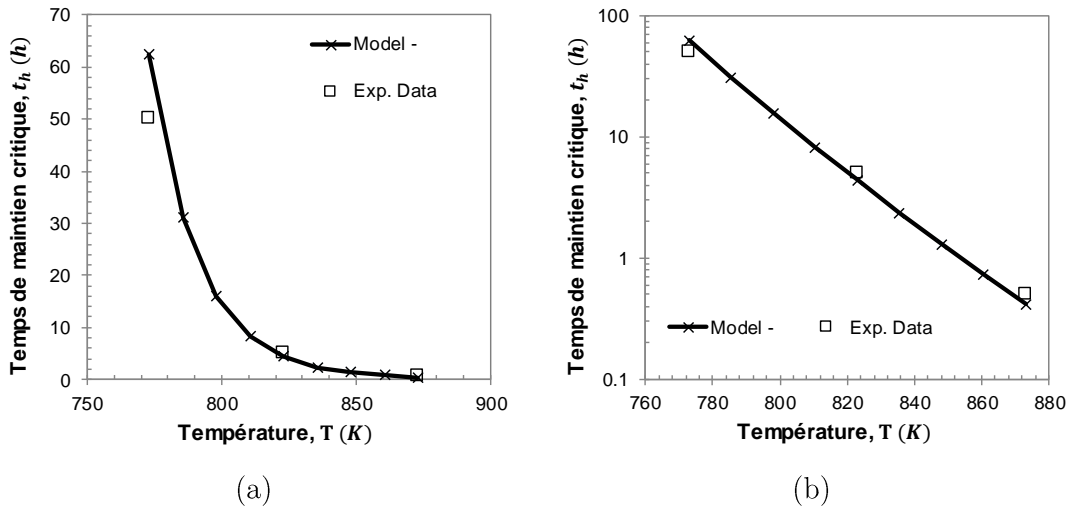


Figure 5.8 Évolution du temps du temps de montée en fonction de la température. Comparaison aux temps critique pour éviter l'apparition des structures de dislocations de la fatigue. (a) En échelle normale et (b) en échelle logarithmique. Les données expérimentales sont prises de [137,153,154].

« Evolution of dislocation climb time as a function of temperature. Comparison with the critical time to avoid dislocation microstructures. (a) In normal scale and (b) in logarithmic scale. Experimental data are taken from [137,153,154]. »

Les temps de montée prédits par l'Équation 5.23 sont en bon accord avec les mesures des temps caractéristiques pour éviter la formation des microstructures des dislocations. Étant donné la facilité d'implémentation, la présence d'une forte explication physique et le bon accord avec les mesures expérimentales, ce modèle sera appliqué dans la suite.

De la même manière, le taux d'annihilation des boucles prismatiques par la montée est déterminé par :

$$\dot{\rho}_{PL}^{cl} = -\frac{\rho_{PL}}{t_{cl}} \quad \text{Équation 5.24}$$

Dans la suite, nous considèrerons en même temps de montée pour les dipôles-coins et les boucles prismatiques, en lien avec le temps critique de maintien pour une homogénéisation de la microstructure.

5.3 Récapitulatif du modèle appliqué aux températures élevées

5.3.1 Lois cristallines

Dans le Chapitre 4, un modèle permettant de décrire les mécanismes physiques liés à la déformation viscoplastique de l'acier 316L(N) à température ambiante a été proposé. Afin de pouvoir adopter d'un modèle représentatif des différents phénomènes observés à haute température, la montée des dipôles coin, le vieillissement dynamique, la création et l'annihilation des boucles prismatiques responsables de l'irréversibilité du glissement et la prise en compte des structures de dislocations sont introduits dans ce modèle. L'ensemble des lois cristallines est récapitulé par les formules suivantes :

Contrainte de cisaillement résolue sur un système i

$$\tau_i = \underline{\underline{\sigma}} : (\underline{\underline{m}}^i \otimes \underline{\underline{n}}^i) \quad \text{Équation 5.25}$$

Critère d'écoulement viscoplastique

$$\tau_i^* = |\tau_i| - \tau_{c,i} \geq 0 \quad \text{Équation 5.26}$$

Contrainte critique (isotrope) sur un système i

$$\tau_{c,i} = \mu b \sqrt{\sum_{j=1}^{12} h_{ij} \rho^j} + \tau_{DSA} \quad \text{Équation 5.27}$$

Glissement viscoplastique des dislocations coins (e) et vis (s)

$$\begin{aligned} \dot{\gamma}_{i,e}^{vp} &= 2v_D b^2 \rho_e^i \cdot \exp\left(-\frac{Q}{\kappa_b T}\right) \cdot \sinh\left(\frac{V\tau_i^*}{\kappa_b T}\right) \\ \dot{\gamma}_{i,s}^{vp} &= 2v_D b^2 \rho_s^i \cdot \exp\left(-\frac{Q}{\kappa_b T}\right) \cdot \sinh\left(\frac{V\tau_i^*}{\kappa_b T}\right) \end{aligned} \quad \text{Équation 5.28}$$

Contrainte liée au vieillissement dynamique (DSA)

$$\begin{aligned} \tau_{DSA} &= f_{DSA} \cdot \mu \cdot C_{sol} \\ C_{sol} &= C_{sat} \left(1 - \exp\left(-\frac{t_a}{\delta_0}\right)^{2/3}\right) \end{aligned} \quad \text{Équation 5.29}$$

$$\begin{aligned}
t_a &= 1 - \frac{t_a}{t_w} \\
t_w &= \frac{(\rho_e^i + \rho_s^i) \cdot b}{|\dot{\gamma}_{i,e}^{vp} + \dot{\gamma}_{i,s}^{vp}| \cdot \sqrt{\rho_t}} \\
\delta_0 &= \left(\frac{C_{sat}}{C_0} \right)^{2/3} \frac{\kappa_B T b^2}{3 \cdot U_{cr} \cdot D^{Cr}} \\
D^{Cr} &= D_o^{Cr} \cdot \exp\left(-\frac{Q_Y^{Cr}}{RT}\right)
\end{aligned}$$

Evolution de la densité des dislocations coins

$$\begin{aligned}
\dot{\rho}_e^i &= \frac{2}{bL} \cdot |\dot{\gamma}_{i,s}^{vp}| \cdot \text{sign}\left(\frac{\dot{\gamma}_s^i}{\dot{\gamma}_s^i}\right) - \frac{2y_e}{b} \cdot \rho_e^i \cdot |\dot{\gamma}_{i,e}^{vp}| \\
&\quad - \left(2\rho_e^i \cdot \frac{h_{max} - y_e}{b} \cdot |\dot{\gamma}_{i,e}^{vp}| - \frac{2y_e}{b} \cdot \rho_d^i \cdot |\dot{\gamma}_{i,e}^{vp}| \right)
\end{aligned} \tag{Equation 5.30}$$

Evolution de la densité des dislocations vis

$$\begin{aligned}
\dot{\rho}_s^i &= \frac{2}{bL} \cdot |\dot{\gamma}_{i,e}^{vp}| \cdot \text{sign}\left(\frac{\dot{\gamma}_e^i}{\dot{\gamma}_e^i}\right) - \frac{2y_s}{b} \cdot \rho_s^i \cdot |\dot{\gamma}_{i,s}^{vp}| \\
&\quad - \left(2\rho_s^i \cdot \frac{y_s - y_e}{b} \cdot |\dot{\gamma}_s^i| - \frac{2y_e}{b} \cdot \rho_{PL}^i \cdot |\dot{\gamma}_e^i| \right)
\end{aligned} \tag{Equation 5.31}$$

Evolution de la densité des dipôles-coins

$$\dot{\rho}_d^i = 2\rho_e^i \cdot \frac{h_{max} - y_e}{b} \cdot |\dot{\gamma}_{i,e}^{vp}| - \frac{2y_e}{b} \cdot \rho_d^i \cdot |\dot{\gamma}_{i,e}^{vp}| - \frac{\rho_d}{t_{cl}} \tag{Equation 5.32}$$

Evolution de la densité des boucles prismatiques

$$\dot{\rho}_{PL}^i = 2\rho_s^i \cdot \frac{y_s - y_e}{b} \cdot |\dot{\gamma}_s^i| - \frac{2y_e}{b} \cdot \rho_{PL}^i \cdot |\dot{\gamma}_e^i| - \frac{\rho_{PL}}{t_{cl}} \tag{Equation 5.33}$$

Libre parcours moyen

$$L = \min \left[\left(\frac{\sqrt{h_{ij}\rho_i}}{K_{jonction}} + \frac{\sum_{j \in \text{copla } i} \sqrt{h_{copla}\rho^i}}{K_{copla}} + \frac{\sqrt{h_0\rho^i}}{K_{self}} \right)^{-1} ; \Phi ; d_{cell} \right] \tag{Equation 5.34}$$

Principe de similitude

$$\begin{aligned}
\text{si } \frac{(\rho_d + \rho_{PL})}{\rho_{tot}} > 0,5 \rightarrow d_{cell} &= \frac{K_{sim}}{\bar{\alpha}_{cyc} \sqrt{\rho_{tot}}} \\
\text{sinon } d_{cell} &= \Phi
\end{aligned} \tag{Equation 5.35}$$

Taille de stabilité maximale des dipôles-coins

$$h_{max} = \frac{\mu b}{8\pi(1-\nu)\tau_i} \tag{Equation 5.36}$$

Temps de montée

$$\begin{aligned}
t_{cl} &= \frac{\mu\kappa_B T}{32\pi^2 D^{sd} b \tau_i^2} \\
D^{sd} &= D_v c_v^0 = D_0^{sd} \exp\left(\frac{Q_f^y}{\kappa_B T}\right)
\end{aligned} \tag{Equation 5.37}$$

5.3.2 Lois de transition d'échelle

Dans les Chapitres 2 et 3, différents modèles auto-cohérents à champs-moyens ont été comparés aux calculs par éléments-finis à champs-complet. Parmi les modèles testés, la loi élasto-viscoplastique de Kröner-Secant s'est montrée plus efficace dans la prédiction de l'effet du temps sur le comportement des polycristaux, pendant la relaxation et le fluage, que le modèle Kröner. Toutefois, l'application de cette loi pour la prédiction du comportement cyclique, notamment la déformation progressive, conduit à une importante surestimation de la déformation cumulée par cycle, dans le cas de faibles contraintes moyennes. La déformation progressive calculée avec le modèle de Kröner est en bon accord avec les résultats des calculs en champs complets réalisés par EF (voir Chapitre 2).

L'application de la loi élasto-viscoplastique Kröner-Secant paraît plus pertinente, étant donné le fort effet visqueux observé pour le 316L(N) à température élevée [3,353,71]. Cependant, lors de chargements en déformation progressive des calculs seront effectués en utilisant la loi de Kröner, qui donne des résultats plus satisfaisants. Ces lois de transition d'échelle s'expriment par :

$$\underline{\underline{\dot{\sigma}}} = \underline{\underline{\dot{\Sigma}}} + 2\mu(1 - \beta) \left(\underline{\underline{\dot{E}^{vp}}} - \underline{\underline{\dot{\epsilon}^{vp}}} \right) + 2\mu(1 - \beta) \eta^{-1} \left(\underline{\underline{\Sigma}}^d - \underline{\underline{\sigma}}^d \right)$$

dont $\beta = \frac{2(4-5\nu)}{15(1-\nu)}$, avec Équation 5.38

$$\text{Kröner : } \eta^{-1} = 0 \text{ et Kröner-Secant : } \eta = \frac{\Sigma_{\text{eq}}}{\dot{E}_{\text{eq}}^{vp}}$$

Où $\underline{\underline{\sigma}}^d$, $\underline{\underline{\dot{\sigma}}}$ et $\underline{\underline{\dot{\epsilon}^{vp}}}$ sont respectivement le tenseur déviateur de contraintes, et les tenseurs de vitesse de contrainte et de vitesse de déformation viscoplastique à l'échelle du cristal. $\underline{\underline{\Sigma}}^d$, $\underline{\underline{\dot{\Sigma}}}$ et $\underline{\underline{\dot{E}^{vp}}}$ sont les tenseurs correspondants à l'échelle macroscopique. Σ_{eq} et \dot{E}_{eq}^{vp} sont respectivement la contrainte et la vitesse de déformation équivalentes macroscopiques de von Mises. Dans le cas où le module $\eta^{-1} = 0$, la loi de Kröner est retrouvée.

5.4 Détermination des paramètres matériau

5.4.1 Paramètres supposés indépendants de la température

Le Tableau 5.2 résume les constantes physiques et les paramètres indépendants de la température retenus dans cette étude pour l'acier 316L(N).

Tableau 5.2 Liste des constantes physiques et des paramètres du matériau indépendants de la température.
Cst. : constantes physiques ; DD. : calculé par la dynamique des dislocations ; Exp. : mesures expérimentales.

« List of physical constants and material parameters independent of temperature. Cst.: physical constants; DD.: calculated by the dynamics of dislocations; Exp.: experimental measurements. »

Constantes physiques		
Paramètres	Valeur	Ref.

κ_b	Constante de Boltzmann	$1.38 \cdot 10^{-23} \text{ J.K}^{-1}$	[34]	Cst.
ν_D	Fréquence de Debye	10^{13} s^{-1}	[34]	Cst.
Paramètres de la matrice d'écroutissage (CFC)				
	Paramètres	Valeur	Ref.	
h_0	Auto-interaction	0.122	[10]	DD
h_{copla}	Interactions coplanaires	0.122	[10]	DD
h_{Lomer}	Jonction de Lomer–Cottrell	0.122	[10]	DD
h_{Hirth}	Jonction de Hirth	0.070	[10]	DD
h_{glis}	Jonction glissiles	0.137	[10]	DD
h_{coll}	Interactions colinéaires	0.625	[10]	DD
Paramètres de la montée de dislocations pour l'acier 316L(N)				
	Paramètres	Valeur	Ref.	
D_0^{sd}	Coefficient d'autodiffusion des lacunes	$5 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$	[352]	Exp.
Q^{sd}	Energie d'autodiffusion des lacunes	284 kJ.mol ⁻¹	[352]	Exp.
Paramètres du DSA pour l'acier 316L(N)				
	Paramètres	Valeur	Ref.	
D_0^{Cr}	Coefficient de diffusion du Chrome	$8 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$	[330]	Exp.
Q_γ^{Cr}	Energie de diffusion du Chrome	243 kJ.mol ⁻¹	[330]	Exp.
U_{cr}	Energie d'interaction Fer-Chrome	0.4 eV	[57]	Exp.
C_0	Concentration nominale de Chrome	0.17	[3]	Exp.
C_{sat}	Concentration à saturation de Chrome	0.53	[153]	
Paramètres du principe de similitude (CFC)				
	Paramètres	Valeur	Ref.	
K_{sim}	Coefficient de similitude cyclique	3.26	[45]	Exp.
$\bar{\alpha}_{cyc}$	Coefficient de durcissement cyclique	0.122	[45]	Exp.
Paramètres identifiés pour l'acier 316L(N)				
	Paramètres	Valeur	Ref.	
ν	Coefficient de Poisson	0.33	[3]	Exp.
K_{self}	Libre parcours lié aux auto-interactions	30	Chap. 5	Exp.
K_{copla}	Libre parcours lié aux interactions coplanaires	800	Chap. 5	Exp.
K_{jonc}	Libre parcours lié aux jonctions	800	Chap. 5	Exp.

La concentration à saturation en atomes de soluté autour des jonctions entre dislocation, C_{sat} , devrait évoluer avec la température [328]. En l'absence de données expérimentales, la valeur identifiée par Rachdi [153] sera considérée pour toutes les températures. Nous avons montré au Chapitre 4 (Section 4.2.2.2), que les paramètres liés au libre parcours moyen des dislocations, K_{self} , K_{copla} et $K_{jonction}$ n'évoluent pas avec la température dans les cas du cuivre et de l'aluminium. Dans le cas de l'acier 316L(N), ces paramètres seront aussi considérés comme indépendants de la température. Les valeurs identifiées à température ambiante à partir de courbes de traction sur des monocristaux seront utilisées. Les six coefficients de la matrice de durcissement de la contrainte, h_{ij} , ont été calculés par la dynamique des dislocations pour les cristaux de CFC [10]. Les paramètres liés à la diffusion

du Chrome et à la diffusion des lacunes ont été déterminés à partir de mesures effectuées sur le 316L(N) SS [330].

5.4.2 Paramètres dépendants de la température

Le module d'élasticité de l'acier 316L(N) sera estimé à l'aide de l'équation proposé pour Gaudin [18] pour la Tôle SQ (cf. Figure 1.9), où le module d'Young, Y , est exprimé en MPa et la température, T , en K :

$$Y = 217500 - 80,9 \cdot T \quad \text{Équation 5.39}$$

L'évolution de la norme du vecteur de Burgers, b , de l'acier 316L(N) en fonction de la température a été mesurée par Gaudin [18] et Gentet [3]. Dans la formule suivante, l'évolution de la norme du vecteur de Burgers est exprimée en nm et la température, T , en K :

$$b = 0,25267 + 4,93159 \cdot 10^{-6} \times T \quad \text{Équation 5.40}$$

Les distances critiques d'annihilation des dislocations vis et coins varient avec la température. Catalao et al. [35] ont mesuré, par microscopie électronique de transmission (MET), la distance critique d'annihilation des dislocations coins en fonction de la température (Figure 5.9a). Cette distance passe de 1,2 nm à la température ambiante à 4 nm à 823 K. Catalao et al. [35] ont aussi proposé des lois permettant de déterminer cette distance. Par souci de simplification, la loi exponentielle, indiquée sur la Figure 5.9a, sera appliquée dans ce travail.

A notre connaissance, aucune mesure expérimentale à haute température n'est disponible dans la littérature pour évaluer la distance critique d'annihilation des dislocations vis dans les aciers austénitiques. Selon Sevillano [354], cette distance peut être définie par :

$$y_s^{Calcul} = \frac{\mu b}{2\pi\tau_{int}} \sin \theta \quad \text{Équation 5.41}$$

Où θ représente l'angle entre les plans primaire et dévié ($\theta \approx 71^\circ$ pour une structure CFC). τ_{int} est souvent assimilé à la contrainte seuil τ_{III} , caractérisant l'annihilation thermiquement activée des dislocations vis par le glissement dévié. Cette contrainte dépend fortement de la température et de l'énergie de faute d'empilement, et peut être définie par la relation semi-empirique proposée par Bonneville et al. [26,355]

$$\frac{\tau_{III}}{\mu} = A_1 \left(1 - \frac{b}{d_0}\right)^2 \cdot \frac{\gamma_{SFE}}{\mu b} - A_2 \left(\frac{\gamma_{SFE}^2}{\mu^3 b^5}\right) \kappa_B T = A_1 \cdot \alpha_1 - A_2 \cdot \alpha_2 \cdot T \quad \text{Équation 5.42}$$

où A_1 et A_2 sont des constantes indépendantes du matériau et d_0 est la largeur des dislocations vis sous contrainte nulle, dont $d_0 = \frac{\mu b^2}{16\pi\gamma_{SFE}}$ [26]. Pour le cuivre, Bonneville et al. [26] ont mesuré la valeur de τ_{III} entre 150 K et 473 K. En utilisant ses

mesures, nous retrouvons : $[A_1 \cdot \alpha_1]^{Cu} = 1.4 \cdot 10^{-3}$ et $[A_2 \cdot \alpha_2]^{Cu} = 2.2 \cdot 10^{-6} K^{-1}$. En appliquant, $\mu_{Cu} = 45 GPa$, $\gamma_{SFE}^{Cu} = 50 mJ \cdot m^{-2}$ et $b = 0.256 nm$ [43], nous pouvons déterminer $A_1 = 0.53$ et $A_2 = 6.4 \cdot 10^3$.

Dans le cas des aciers austénitiques, il est observé que l'énergie de faute d'empilement varie en fonction de la température [297]. Toutefois, les mesures expérimentales sont limitées à un intervalle de température entre 293 K et 600 K, avec une tendance à saturation de la valeur de γ_{SFE} aux températures plus élevées (cf. Figure 5.4). A cause la manque de données dans l'intervalle de température qui nous intéresse, nous considérons une valeur constante de l'énergie de faute d'empilement, $\gamma_{SFE}^{316LN} = 30 mJ \cdot m^{-2}$, ce qui résulte également dans une valeur constante d_0 .

En appliquant l'Équation 5.42 à l'acier 316L(N), la contrainte τ_{III} peut être reliée à la température par l'équation :

$$\tau_{III}^{316L(N)} = 79.65 - 0.056T; R^2 = 0.989 \quad \text{Équation 5.43}$$

La Figure 5.9b présente l'évolution de y_s^{calcul} en fonction de la température. La distance d'annihilation y_s^{calcul} augmente avec la température, favorisant l'activation du glissement dévié.

Le jeu d'équations utilisé, résulte dans une valeur de la distance critique d'annihilation des dislocations vis presque deux fois plus grande que la valeur mesuré par, Feaugas [216] à température ambiante: $y_{s,293K}^{exp} = 15 nm$. Toutefois, dans le Chapitre 3, nous avons montré que l'utilisation d'une valeur 50% plus grande que celle mesuré par Feaugas a un faible effet sur la prédiction du comportement cyclique de l'acier 316L(N). Une étude sur la sensibilité des distances critiques d'annihilation des dislocations vis et coins, à température élevée, sur la prédiction du comportement cyclique de l'acier 316L(N), est également faite sur la Section 5.6.

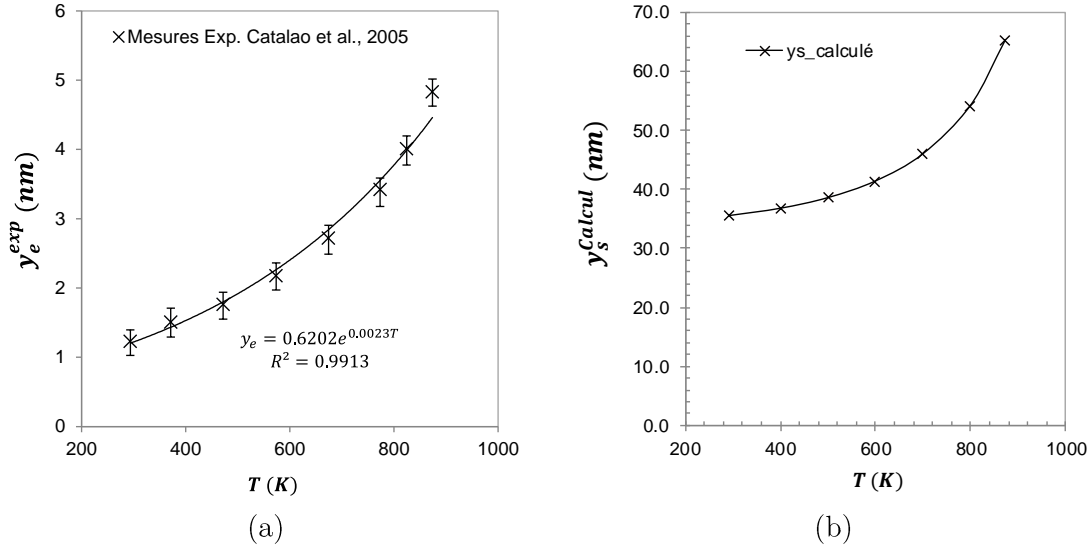


Figure 5.9 (a) Mesures expérimentales de la distance d'annihilation des dislocations coins à différentes températures [35]. (b) Évolution de la distance critique d'annihilation des dislocations vis en fonction de la température, calculée en utilisant l'Équation 5.41 et l'Équation 5.43.

« (a) Experimental measurements of the annihilation distance for edge dislocations at different temperatures [35]. (b) Evolution of the critical annihilation distance for screw dislocations as a function of temperature, calculated using Équation 5.41 and Équation 5.43. »

5.4.3 Identification des paramètres de viscoplasticité cristalline et du DSA

L'ensemble des équations précédentes a été introduit dans le logiciel de simulation SiDoLo [182]. Une distribution cristalline aléatoire de grains est considérée, permettant un comportement global isotrope. Le polycristal est composé de 100 grains, permettant une prédiction correcte du comportement macroscopique (cf. Chapitre 2).

Les paramètres ajustables restant à identifier sont V , Q et f_{DSA} . L'identification de ces paramètres a été effectuée en comparant les résultats du modèle à des courbes de traction réalisées à différentes températures et à différentes vitesses de déformation sur l'acier 316L(N) (tôle SQ, courbes issues de la base de donnée du CEA et de la thèse de Rachdi [153]). En fonction de la vitesse de déformation, trois domaines de comportement sont observés [57] :

- Un domaine de faible vitesse de déformation où la contrainte décroît lorsque la vitesse de déformation décroît. Ce domaine correspond au trainage des atomes de soluté par les dislocations en mouvement ;
- Un domaine de vitesse de déformation intermédiaire, où la contrainte diminue avec la vitesse de déformation croissante. Cette sensibilité inverse à la vitesse de déformation est liée aux interactions entre les atomes de soluté et les dislocations;
- Un domaine de vitesse de déformation élevée, où la contrainte augmente avec la vitesse de déformation croissante. Ce domaine, dit de friction, correspond au régime

où les atomes de soluté n'ont pas le temps de diffuser vers les dislocations qui glissent rapidement.

Le jeu de paramètres optimal, identifié à partir de courbes de traction réalisées à des vitesses de déformation correspondant aux trois domaines de comportement, est présenté dans le Tableau 5.3 pour les deux modèles de transition d'échelle considérés.

Tableau 5.3 Valeurs des paramètres liés à la viscosité et au DSA identifiés sur les courbes de traction à différentes vitesses de chargement et différentes températures.

« Viscosity and DSA parameters identified using tensile curves at different strain rates and temperatures. »

Kröner-Secant	V	Volume d'activation	$340b^3$
	Q	Énergie d'activation	2.5 eV
	f	Paramètre DSA	0.00125
Kröner	V	Volume d'activation	$370b^3$
	Q	Énergie d'activation	2.53 eV
	f	Paramètre DSA	0.00125

Dans le cas du modèle Kröner-Secant, les courbes simulées à l'aide de ces paramètres sont comparées aux courbes expérimentales à la Figure 5.10.

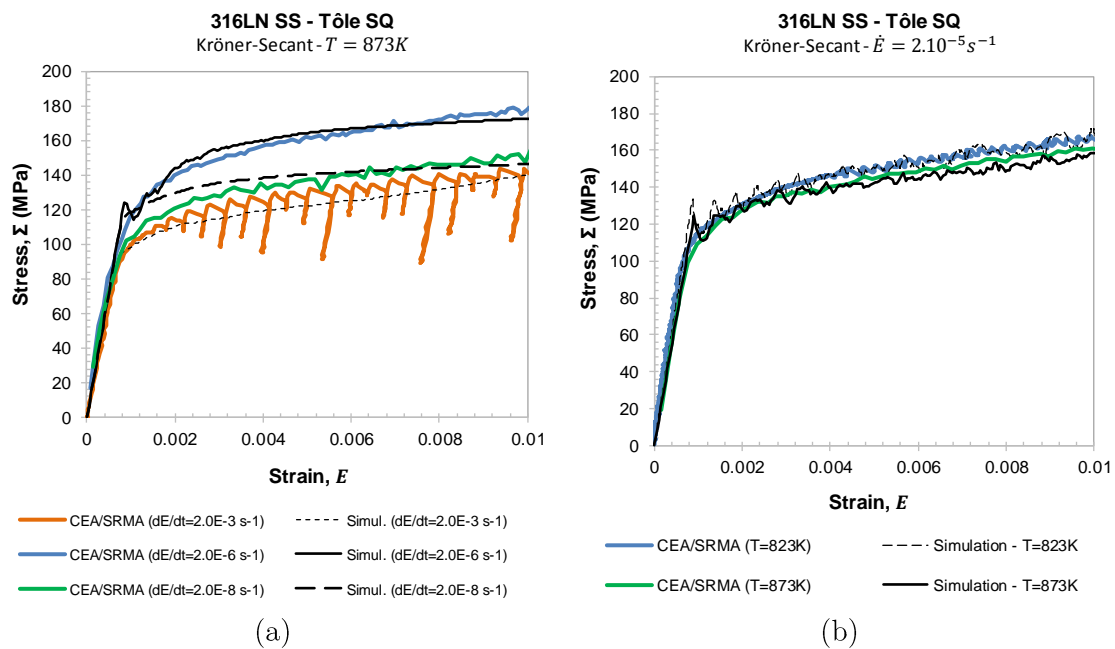


Figure 5.10 Comparaison entre les courbes de traction simulées et les courbes expérimentales. (a) À 873 K et différentes vitesses de déformation. (b) À différentes températures et la même vitesse de chargement.

« Comparison between calculated and experimental tensile curves. (a) At 873 K and different strain rates. (b) At different temperatures. »

Nous notons que les courbes prédites par le modèle sont proches de celles obtenues expérimentalement, pour les différentes vitesses de sollicitation (Figure 5.10a) et températures (Figure 5.10b). Des serrations sont également observées sur les courbes

prédites par le modèle pour les deux vitesses 2.10^{-6} s^{-1} et 2.10^{-5} s^{-1} , à 873K, ce qui est en accord avec les courbes obtenues expérimentalement. Toutefois, les fortes serrations observées expérimentalement à une vitesse de déformation de 2.10^{-3} s^{-1} ne sont pas prédites.

Dans le cas des deux modèles, l'énergie d'activation identifiée sur les courbes de traction est très proche à l'énergie liée à la diffusion des atomes de Chrome dans une matrice austénitique ($Q_{\gamma}^{Cr} = 243 \text{ kJ.ml}^{-1} \equiv 2.5 \text{ eV}$) et de l'énergie de l'autodiffusion des lacunes dans l'austénite ($Q^{sd} = 284 \text{ kJ.ml}^{-1} \equiv 2.9 \text{ eV}$).

Le volume d'activation identifié est peu plus élevé que celui identifié par Feaugas [88] et Gentet [3] sur l'acier 316L(N), de l'ordre de 250 b³. Ces auteurs attribuent cette valeur à l'activation du glissement dévié. Néanmoins, l'énergie d'activation du glissement dévié rapportée par Feaugas [88] est de l'ordre de 1,2 eV, 2 fois plus faible que l'énergie d'activation identifiée.

La valeur du volume d'activation peut être également reliée aux interactions entre les dislocations mobiles et les obstacles présents dans le réseau cristallin (solution solide) [31].

Le pré-facteur f_{DSA} est cohérent avec la valeur prédite par le modèle théorique de Mott (Équation 5.10), en utilisant les valeurs de rayons atomiques mesurés par Smith [333].

L'évolution de la contrainte macroscopique en fonction de la vitesse de déformation à 873K est présentée sur la Figure 5.11 pour trois valeurs de déformation totale. Sur cette figure, les trois domaines de comportement visqueux sont illustrés en fonction de la vitesse de déformation. L'évolution de la contrainte moyenne liée au DSA (τ_{moy}^{DSA}) et de la contrainte visqueuse moyenne (τ_{moy}^*) sont également représentées, pour une déformation totale $E = 0.5\%$. Cette dernière est définie par la moyenne de τ_i^* sur les systèmes de glissement activés au sens d'un seuil de $|\gamma_i^{vp}| = 10^{-5}$, ($i = 1,12$). L'opération de moyenne s'étend aux 100 grains du polycristal.

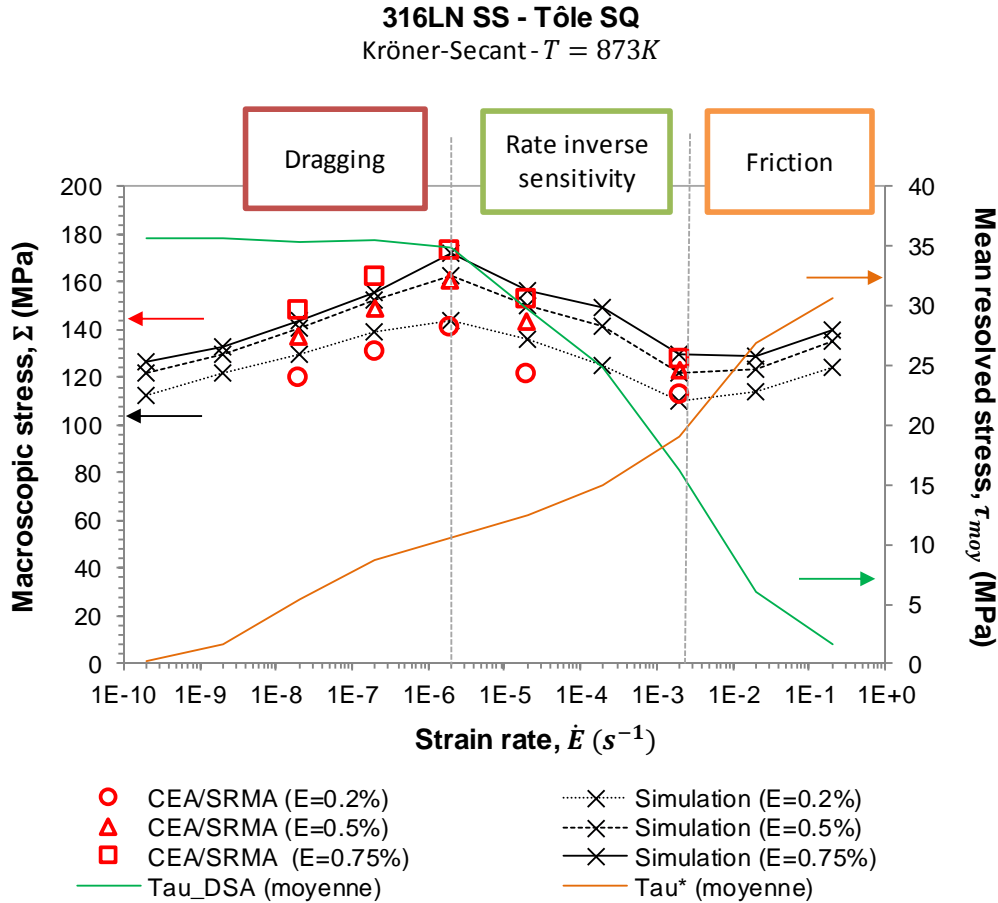


Figure 5.11 Evolution de la contrainte d'écoulement, sous différentes déformations, à 873K, en fonction de la vitesse de déformation. Grâce à l'axe secondaire (verticale à la droite de la figure), les évolutions moyennées de la cission liée au DSA et de la cission visqueuse sur les systèmes actifs et sur tout le polycristal peuvent être étudiées.

« Flow stress evolution, at 873K, as a function of the strain rate. In secondary axis (vertical axis on the right side), the DSA-related mean stress evolution and the viscous mean stress evolution, defined by the mean value of all active slip systems in the polycrystal, are plotted. »

Nous pouvons observer que le modèle permet de reproduire l'effet du vieillissement dynamique sur la vitesse de déformation à partir de l'identification du paramètre f_{DSA} . Aux fortes vitesses de déformation, $\dot{E} > 5.10^{-3} s^{-1}$, la contrainte DSA est plus faible que la contrainte visqueuse. La contrainte macroscopique tend donc à augmenter avec la vitesse de chargement (Figure 5.11). Dans un domaine de vitesse de déformation intermédiaire, entre $5.10^{-3} s^{-1}$ et $2.10^{-6} s^{-1}$, un effet inverse de la vitesse de chargement est observé. Le niveau de la contrainte d'écoulement augmente lorsque la vitesse de chargement diminue. Ceci est lié aux interactions entre les dislocations mobiles et les atomes de solutés en diffusion. L'ancrage des dislocations induit une contrainte DSA plus élevée que la contrainte visqueuse (Figure 5.11). Pour des faibles vitesses de déformation, $\dot{E} < 2.10^{-6} s^{-1}$, la contrainte liée au DSA est élevée mais indépendante de la vitesse de déformation. L'effet du DSA est saturé. L'évolution de la contrainte visqueuse avec la vitesse de déformation dicte l'évolution de la contrainte d'écoulement macroscopique.

Ce comportement est observé pour toutes les températures situées dans le domaine où le DSA est attribué à la solution solide de Chrome. Lorsque la température diminue, un décalage du domaine de sensibilité inverse à la vitesse de déformation est observé, comme cela est indiqué sur la Figure 5.12a. Ce décalage vers des vitesses de déformation plus faibles lorsque la température diminue est lié à l'évolution de la contrainte DSA et de la contrainte visqueuse avec la température (Figure 5.12b).

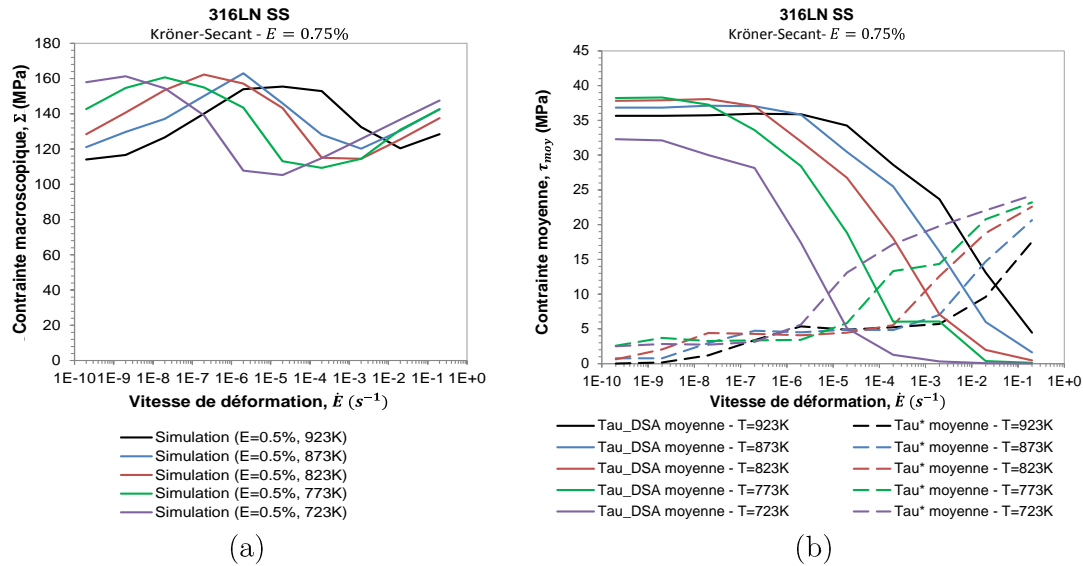


Figure 5.12 (a) Variation du domaine de sensibilité inverse à la vitesse avec la température. (b) Variation de la cission visqueuse et de la cission liée au DSA en fonction de la vitesse de déformation pour les températures entre 723K et 923K.

« (a) Inverse rate sensitivity domain at different temperature. (b) Variation of viscous resolved mean stresses and DSA-related resolved mean stresses as a function of strain rate for temperatures between 723K and 923K. »

5.5 Validation du modèle

Les prédictions du modèle sont comparées avec les données expérimentales obtenues entre 723 et 973K pour deux approvisionnements d'acier 316L(N) : la tôle SQ et la tôle Avesta. Les matériaux de l'étude ont été présentés dans le Chapitre 1 de ce manuscrit, présentant des compositions chimiques très similaires. La validation du modèle développé dans ce travail est réalisée pour des chargements de relaxation, de fatigue et fatigue-relaxation (en traction) et de déformation progressive en traction-torsion.

5.5.1 Relaxation

La Figure 5.13 compare les courbes de relaxation simulées avec celles mesurées expérimentalement à 873K après une déformation de traction de 0.7% sous différentes vitesses de mise en charge.

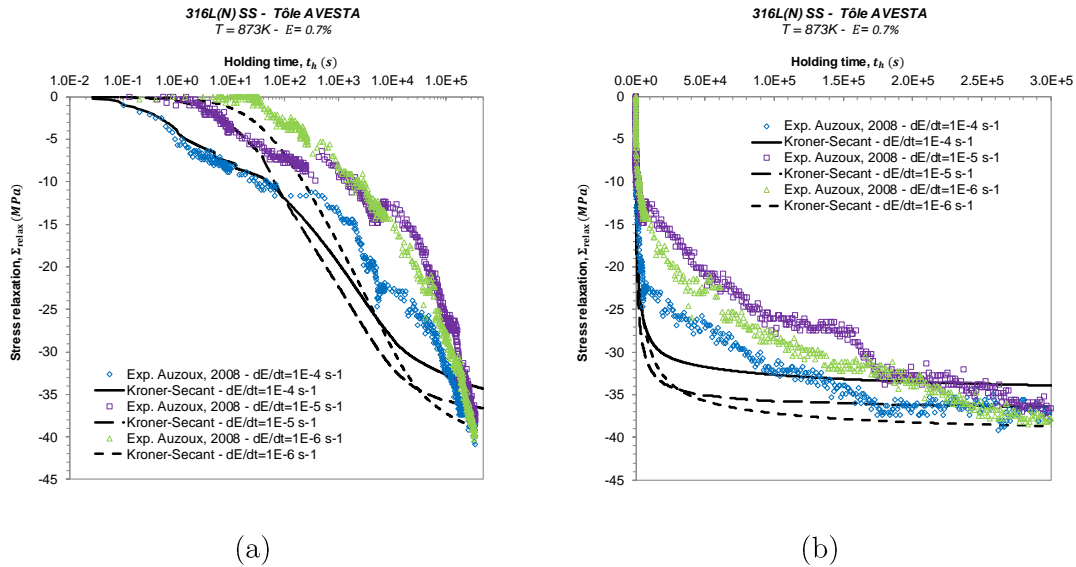


Figure 5.13 Comparaison entre les courbes de relaxation simulées (Kröner-Secant) et les courbes expérimentales [249]. (a) Échelle log et (b) échelle normale

« Comparison between calculated (Kröner-Secant) and experimental relaxation curves [249]. (a) Logarithmic scale and (b) normal scale. »

Nous pouvons observer que le comportement en relaxation de l'acier 316L(N) dépend de la vitesse de mise en charge [249]. Le modèle est capable de rendre compte de l'effet de la vitesse de mise en charge sur la relaxation. Après quelques secondes, les relaxations prédites sont plus rapides que les relaxations expérimentales. Pour de longues durées de relaxation, le modèle fait apparaître une stabilisation de la contrainte relaxée qui n'est pas observée expérimentalement.

Plusieurs mécanismes sont à l'origine de la relaxation de la contrainte : (i) la variation de la contrainte visqueuse, (ii) la restauration des dipôles et des boucles prismatiques par la montée des dislocations et (iii) l'évolution des contraintes internes.

La baisse de la contrainte visqueuse représente le mécanisme principal à l'origine de la relaxation. La Figure 5.14 présente l'évolution de la contrainte visqueuse moyenne en fonction du temps de maintien, pour les trois vitesses de déformation appliquées. Comme cela a été montré à la Section 5.4.3, la valeur de la contrainte visqueuse à la fin de la mise en charge tend à diminuer avec la vitesse de déformation. A partir de la Figure 5.14, nous observons que la contrainte visqueuse commence à décroître plus rapidement dans le cas d'une vitesse de déformation plus grande. Cela a pour reflexe une vitesse de relaxation macroscopique qui évolue aussi plus rapide pour une mise en charge à $\dot{E} = 10^{-4} s^{-1}$ (Figure 5.13). De plus, contrairement aux observations expérimentales, la relaxation de la contrainte macroscopique tend à la saturation pour des longs temps de maintien. En effet, lorsque la valeur de la contrainte visqueuse tend vers zéro (Figure 5.14).

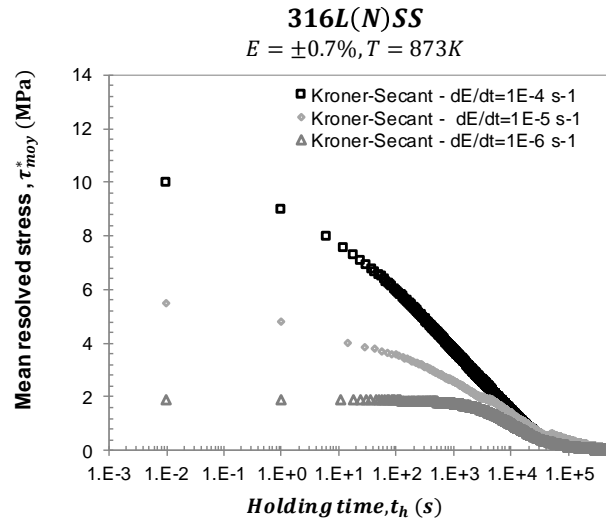


Figure 5.14 Evolutions moyennées de la cission visqueuse, sur les systèmes actifs et sur tout le polycristal, pour différentes vitesses de mise en charge. Un système, i , est considéré actif lorsque $|\gamma_i^{vp}| > 10^{-4}$.

« Viscous mean stress evolution, defined by the mean value of all active slip systems in the polycrystal, for different strain rates. A slip system, i , is assumed to be active when $|\gamma_i^{vp}| > 10^{-4}$. »

La Figure 5.15 présente l'évolution de la densité des dislocations pendant le temps de maintien en relaxation. Lors du temps de maintien, les densités de dipôles et de boucles prismatiques diminuent grâce aux mécanismes de restauration (montée des dislocations). La variation de la densité de dislocations dépend de la vitesse de mise en charge. Un palier de saturation est observé après un temps de maintien de l'ordre de 900 minutes pour la vitesse de mise en charge de $\dot{E} = 10^{-4} \text{ s}^{-1}$, avec la dissolution d'environ 50% de la densité initiale de dipôle-coins et de boucles prismatiques. Cette dissolution a un effet direct sur la contrainte critique, τ_c . Cette baisse de la contrainte due à la montée des dislocations peut être estimée à la densité des dislocations totale par l'équation de Taylor :

$$\tau_c^{\text{forêt}} = \bar{\alpha}_{mon} \mu b \sqrt{\rho} \quad \text{Équation 5.44}$$

Où le coefficient de durcissement sous chargement monotone, $\bar{\alpha}_{mon}$, est estimé à 0.35 [10]. La variation de la densité de dislocations lors du temps de maintien, pour la vitesse de mise en charge de $\dot{E} = 10^{-4} \text{ s}^{-1}$, correspond à une variation de la contrainte critique estimée à l'ordre de 3,5 MPa. Cette baisse de la contrainte critique, résulte dans une variation positive de la contrainte visqueuse, $\Delta\tau^* > 0$, qui favorise le mécanisme de relaxation.

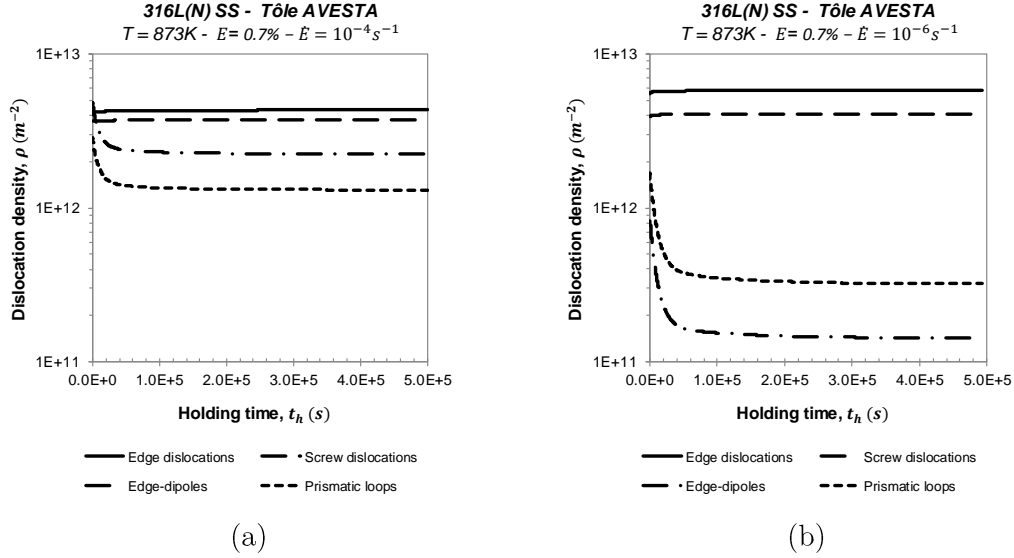


Figure 5.15 Évolutions des densités de dislocations prédites pendant le temps de maintien, pour des mises en charge en traction à (a) $\dot{E} = 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ et (b) $\dot{E} = 10^{-6} \text{ s}^{-1}$.

« Evolutions of dislocations densities during holding time : (a) $\dot{E} = 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ et (b) $\dot{E} = 10^{-6} \text{ s}^{-1}$. »

Nous notons également sur la Figure 5.15 que les densités des dipôles-coins et boucles prismatiques sont plus grandes dans le cas d'une mise en charge à $\dot{E} = 10^{-4} \text{ s}^{-1}$. Le rapport entre les termes de création et d'annihilation pour ces structures est plus faible dans le cas des faibles vitesses de déformation viscoplastique, car les mécanismes de restauration sont plus importants.

Expérimentalement, le temps caractéristique pour relaxer en 50% la contrainte, dans le cas de l'essai à la vitesse de mise en charge de 10^{-6} s^{-1} , est de l'ordre de 400 minutes. Le temps calculé est réduit à 36 minutes. Toutefois, il a été montré dans le Chapitre 2 que la loi de transition d'échelle Kröner-Secant est en très bonne accord avec les courbes obtenues par la méthode des éléments-finis en champs-complets.

Pour améliorer les prédictions de la relaxation des aciers martensitiques (grade 91), un mécanisme d'arrêt progressif des dislocations basé sur les hypothèses de Foreman et Makin [356] a été récemment proposé [357]. Foreman et Makin [356] montrent que, la distribution des obstacles dans les aciers étant hétérogène, l'utilisation d'une contrainte visqueuse unique, appliquée à toutes les dislocations d'un système de glissement, est discutable, en particulier dans le cas des faibles contraintes. En effet, ils montrent qu'il existe un domaine intermédiaire de contrainte de cisaillement pour lequel certaines dislocations glissent entre les d'obstacles, tandis que d'autres dislocations sont bloquées par des obstacles plus forts distribués localement. Cela pourrait expliquer la raison pour laquelle la relaxation de la contrainte tend à évoluer expérimentalement pour des très long temps de maintien [358].

Ce mécanisme a été observé expérimentalement et reproduit par la dynamique des dislocations. Lors du glissement viscoplastique, des dislocations passent des obstacles

repartis aléatoirement et ne s'arrêtent pas toutes en même temps. Lorsque la contrainte visqueuse atteint une valeur inférieure à la contrainte critique, $\tau^* < \tau_c$, il est montré que le blocage des dislocations se produit de façon progressive. La mise en œuvre d'un tel mécanisme peut améliorer la prédiction de la relaxation à plus long terme.

5.5.2 Déformation cyclique

L'évolution de l'amplitude de contrainte, Σ_a , en fonction du nombre de cycles, obtenue en déformation cyclique symétrique à 823K sur la tôle SQ en acier 316L(N) à $T = 823K$, est présentée sur la Figure 5.17 pour différentes amplitudes de déformation. Les courbes simulées en utilisant les lois de transition d'échelle de Kröner et Kröner-Sécant sont également représentées pour comparaison. La Figure 5.16 montre la comparaison entre la CSSC calculé et celle obtenue à partir des données expérimentales.

Le fort durcissement cyclique observé pour les aciers 316L(N) à température élevée est prédit par le modèle (Figure 5.17). Toutefois, l'amplitude de contrainte des premiers cycles est légèrement sous-estimée et une cinétique de durcissement plus rapide est prédite par la modèle. Nous pouvons observer un bon accord entre les amplitudes de contraintes calculées et expérimentales atteintes au cycle stabilisé (Figure 5.16).

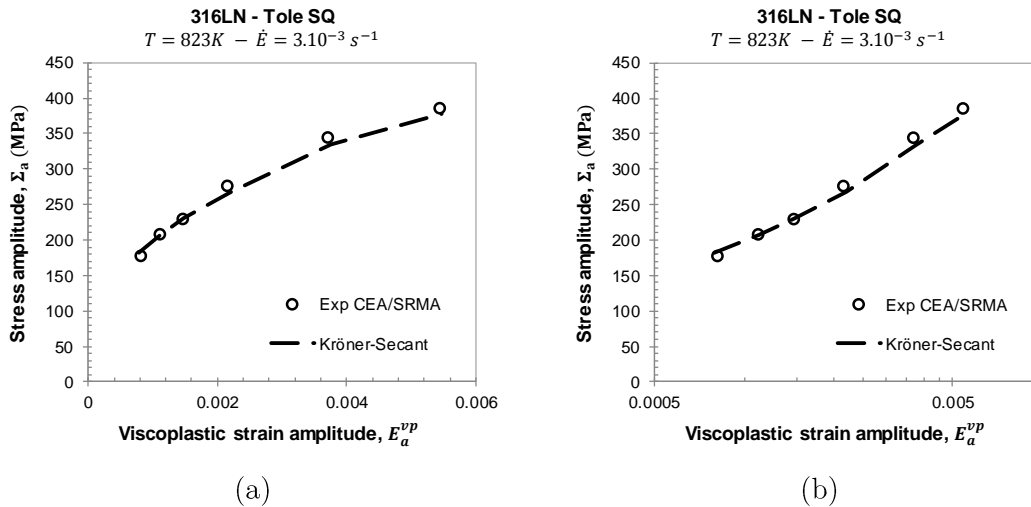


Figure 5.16 Comparaison entre la courbe contrainte-déformation calculée et celle mesurée expérimentalement. (a) Echelle normale et (b) échelle logarithmique. Acier 316L(N) (tôle SQ) à 823K.

« Comparison between the predicted and the experimental cyclic stress-strain curves. (a) plotted in standard scale and (b) plotted in logarithm scale. 316L(N) SS at 823K. »

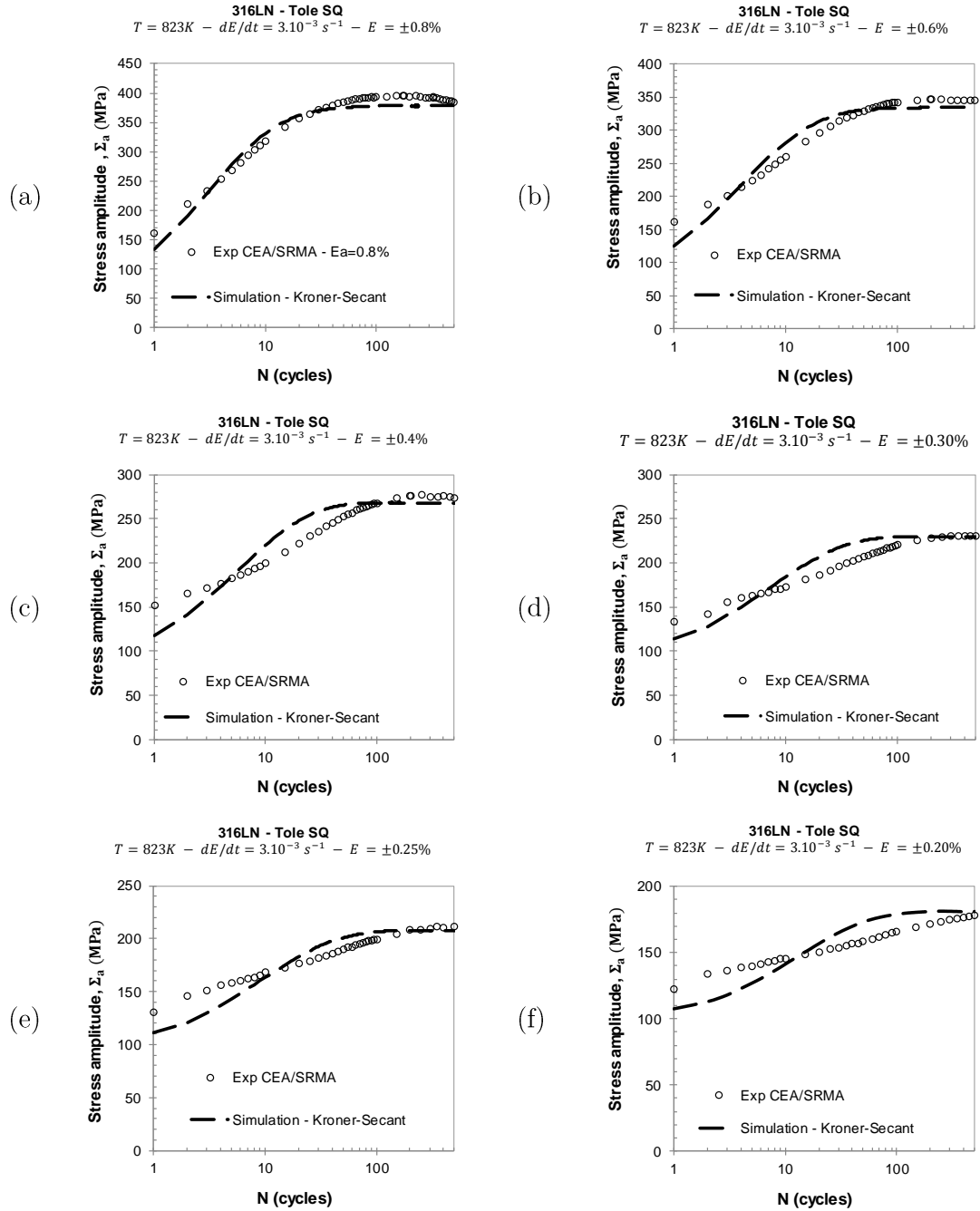


Figure 5.17 Évolution de l'amplitude contrainte pour et différentes amplitudes de déformation à 823K : (a) $E = \pm 0.8\%$, (b) $E = \pm 0.6\%$, (c) $E = \pm 0.4\%$, (d) $E = \pm 0.3\%$, (e) $E = \pm 0.25\%$ et (f) $E = \pm 0.2\%$.

« Stress amplitude evolution for different cyclic strain amplitudes, at 823K : (a) $E = \pm 0.8\%$, (b) $E = \pm 0.6\%$, (c) $E = \pm 0.4\%$, (d) $E = \pm 0.3\%$, (e) $E = \pm 0.25\%$ et (f) $E = \pm 0.2\%$. »

La Figure 5.18 compare les courbes de contrainte et déformation au premier cycle et au cycle stabilisé, pour $E = \pm 0.8\%$ et $E = \pm 0.2\%$. Lors du premier cycle, le fort durcissement observé pendant le chargement en compression n'est pas correctement prédit par le modèle. Toutefois, le modèle reproduit correctement les pics de contrainte des cycles stabilisés.

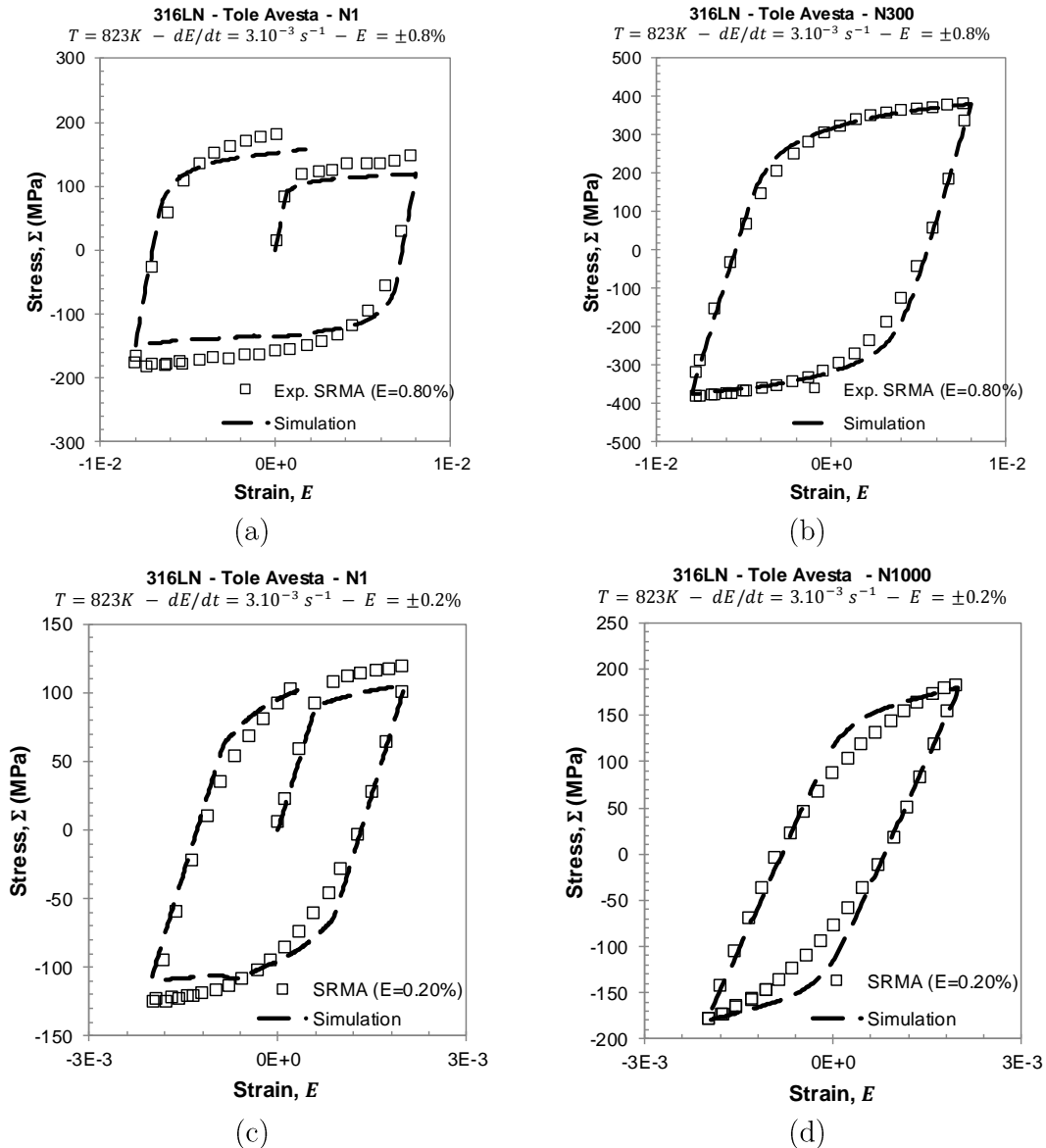


Figure 5.18 Acier 316L(N), boucles de contrainte déformation à 823K $E = \pm 0.8\%$; (a) $N=1$ et (b) $N=250$, cycle stabilisé, et $E = \pm 0.2\%$, (c) (a) $N=1$ et (b) $N=1000$, cycle stabilisé.

« 316L(N) SS, Stress-strain loops at 823K: $E = \pm 0.8\%$ (a) $N = 1$ and (b) $N = 250$, stabilized cycle, and $E = \pm 0.2\%$ (c) (a) $N = 1$ and (b) $N = 1000$, stabilized cycle. »

La Figure 5.19 présente l'évolution de l'amplitude de contrainte, et les courbes contrainte-déformation du premier cycle et du cycle à saturation pour une déformation $E = \pm 0.3\%$, à différentes températures. L'évolution de l'amplitude de contrainte est bon accord avec les courbes expérimentales obtenues aux différentes températures considérées. Dans le cas de plus faibles amplitudes de contrainte, le modèle tend à surestimer la limite d'élasticité. Les pics des contraintes sont bien prédits, mais pas la forme de la boucle.

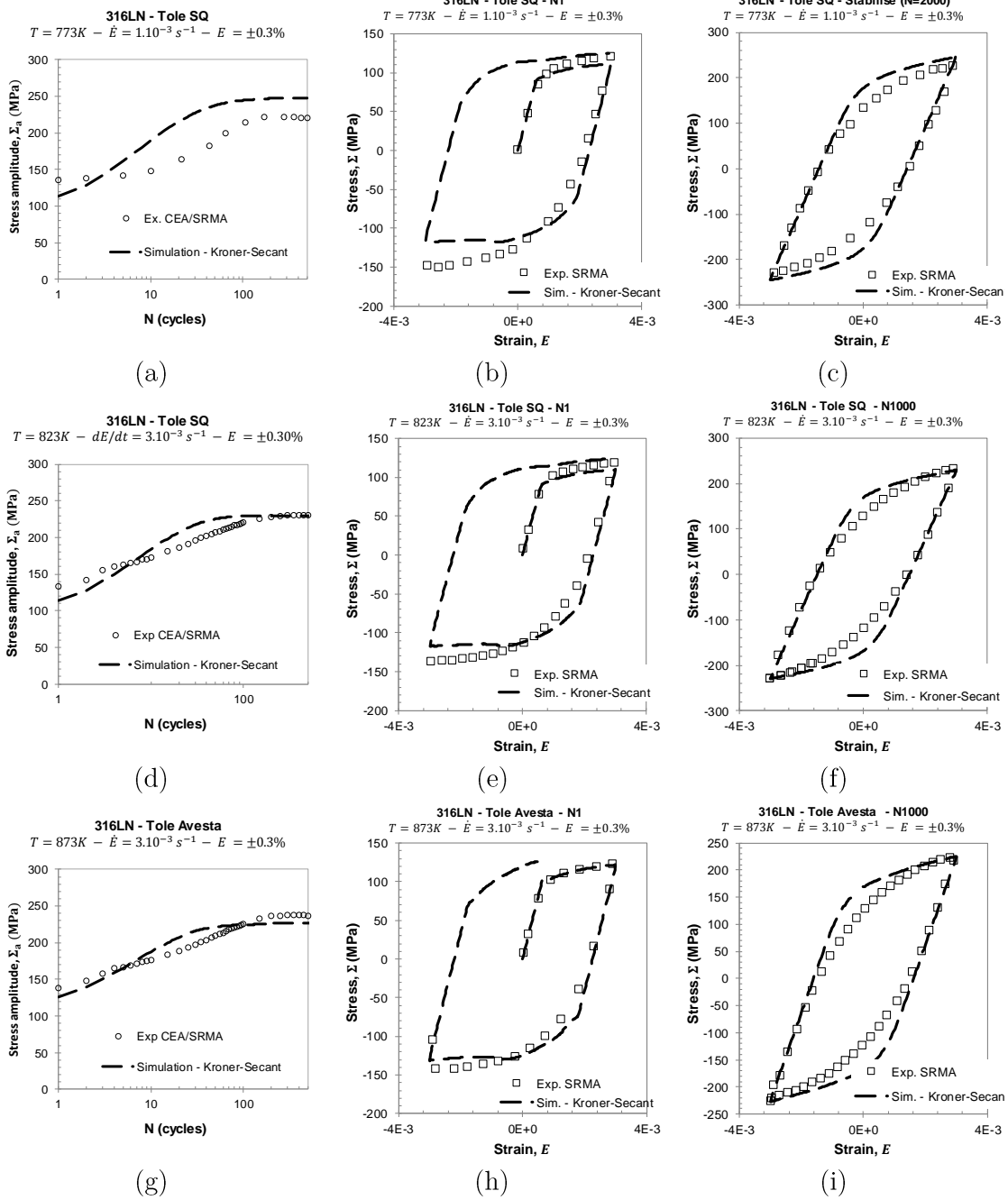


Figure 5.19 Essai de déformation cyclique à $E = 0.3\%$. Évolution de l'amplitude de contrainte à : (a) 773K, (d) 823 K et (g) 873K. Première boucle contrainte-déformation à : (b) 773K, (e) 823 K et (h) 873K. Boucle contrainte-déformation à saturation : (c) 773K, (f) 823 K et (i) 873K.

« Cyclic deformation, $E = 0.3\%$. Evolution of cyclic stress amplitude at: (a) 773K, (d) 823 K and (g) 873K. First stress-strain loop at: (b) 773K, (e) 823 K and (h) 873K. Stabilized stress-strain loop: (c) 773K, (f) 823 K and (i) 873K. »

Contrairement à ce qui a été observé à température ambiante, seulement la phase de durcissement est observée pour l'acier 316L (N) lors des chargements cycliques à haute température. L'absence de la phase d'adoucissement cyclique peut être reliée au développement très rapide d'une microstructure de dislocations, même aux faibles

amplitudes de déformation viscoplastique, ce qui n'est pas le cas observé aux plus faibles températures [3,64].

Quelle que soit l'amplitude de déformation cyclique appliquée, le durcissement cyclique calculé est plus rapide que celui observé expérimentalement (Figure 5.17 et Figure 5.19). La création des dipôles-coins et des boucles prismatiques et le développement d'une microstructure de dislocations bien définie sont les principaux mécanismes liés au durcissement cyclique. Les évolutions des densités de dislocations et la cission critique induite par les différentes populations de densité de dislocations sont présentées sur la Figure 5.20. La cission liée aux interactions de type arbre de forêt est estimée grâce l'équation de Taylor :

$$\tau_c^{\text{forêt}} = \bar{\alpha}_{cyc} \mu b \sqrt{\rho} \quad \text{Équation 5.45}$$

Où le coefficient de durcissement sous chargement cyclique, $\bar{\alpha}_{cyc}$, est égal 0.122 [45](cf. Tableau 5.2).

Comme il a été également observé dans le Chapitre 3, la densité des dislocations vis et coins est inférieure à celle des dipôles (Figure 5.20.), ce qui est la condition nécessaire pour pouvoir permettre l'apparition des structures de dislocations. Les densités de dislocations tendent à la saturation après quelques dizaines de cycles, à une déformation viscoplastique cumulée de l'ordre de 0.22 pour toutes les amplitudes de déformation cyclique appliquées. Au cycle stabilisé, les densités de dipôles-coins et de boucles prismatiques résultent en plus de 70% de la contrainte critique liée aux interactions de type arbre de forêt.

Dans le cas des dislocations vis et coins, l'évolution de la densité de dislocations est proportionnelle à un terme exponentiel : $\rho_{(*)}(t) \propto \exp\left(-\frac{\gamma_{(*)}}{b} \cdot \dot{\gamma}_{(*)} \cdot t\right)$, avec $(*) = e, s$ (par l'intégration de l'Équation 5.30 et l'Équation 5.31). En comparant les distances d'annihilation des dislocations vis et coins, dont $\gamma_e \ll \gamma_s$, nous obtenons un temps caractéristique de saturation plus grande lié à la distance γ_e . Le modèle tend à une sensibilité plus importante par rapport à ce parametre, comme nous le montrons dans la Section 5.6.

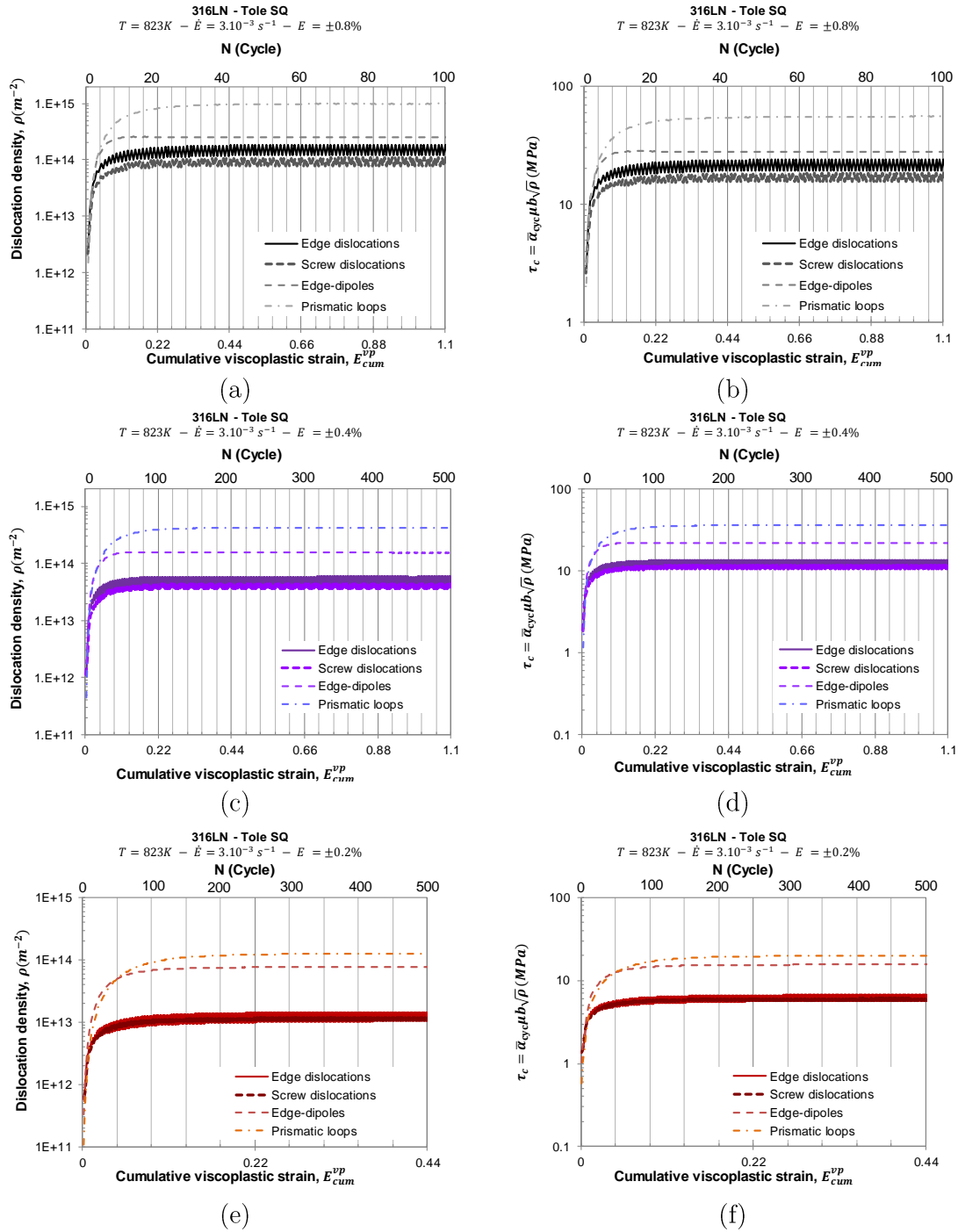


Figure 5.20 Évolution des densités des différentes populations de dislocations lors des essais de déformation cyclique à 823K : (a) $E = \pm 0.8\%$, (c) $E = \pm 0.4\%$ et (e) $E = \pm 0.2$. Cission critique induite par les différentes populations de densité de dislocations : (b) $E = \pm 0.8\%$, (d) $E = \pm 0.4\%$ et (f) $E = \pm 0.2$.

« Dislocation densities evolution, under cyclic deformation at 823K and : (a) $E = \pm 0.8\%$, (c) $E = \pm 0.4\%$ and (e) $E = \pm 0.2$. Critical resolved stress induced by the different populations of dislocation densities (b) $E = \pm 0.8\%$, (d) $E = \pm 0.4\%$ and (f) $E = \pm 0.2$. »

La Figure 5.21 compare les valeurs de la densité de dislocations mobiles ($\rho_e + \rho_s$) et immobiles ($\rho_d + \rho_{PL}$) prédites par le modèle et celles mesurées par Gentet [3], à deux amplitudes de déformation viscoplastiques différentes. La prédiction de la densité de dislocations à plus faible amplitude de déformation viscoplastique est en bon accord avec

les mesures expérimentales, toutefois, le modèle tend à surestimer la densité de dislocations aux plus fortes amplitudes de déformation.

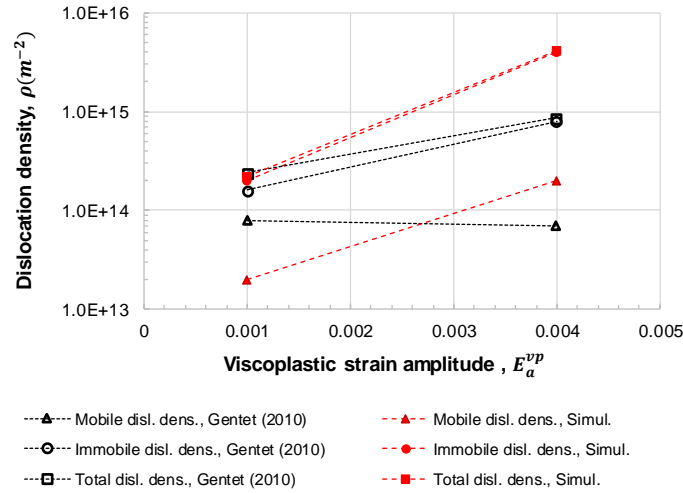


Figure 5.21 Comparaison entre les densités de dislocations mobiles ($\rho_e + \rho_s$), immobiles ($\rho_d + \rho_{PL}$) et totale calculées et celles mesurées expérimentalement [3].

« Comparison between mobile ($\rho_e + \rho_s$), immobile ($\rho_d + \rho_{PL}$) and total computed dislocation densities and those experimentally measured [3]. »

La même cinétique est observée pour l'évolution de la taille des cellules (Figure 5.22), ce qui est attendu, étant donné la taille moyenne des cellules de dislocations est dépendante de la densité de dislocation. Il convient de noter que la taille des cellules au cycle stabilisé est en bon accord avec les mesures expérimentales réalisées sur des aciers 316L(N) : $d_{cell} = 0.3 \mu m$ pour $E^{vp} = \pm 0.4\%$ à 823K [3] ; $d_{cell} = 0.4 \mu m$ pour $E^{vp} = \pm 0.3\%$ à 873K [64] ; $d_{cell} = 0.5 \mu m$ pour $E^{vp} = \pm 0.2\%$ à 873K [103].

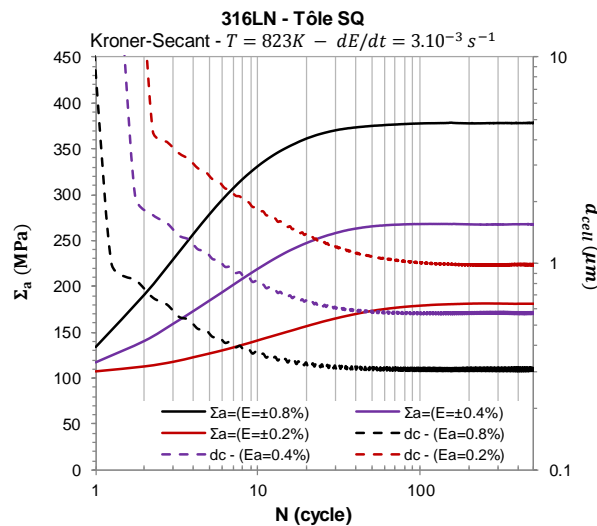


Figure 5.22 Comparaison entre l'évolution de l'amplitude de contrainte et la taille moyenne des cellules, pour des chargements à 823 K et différentes amplitudes de déformation.

« Comparison between the stress amplitude of stress and the mean cell size evolutions, at 823 K and under different strain amplitudes. »

5.5.3 Fatigue-Relaxation

La Figure 5.23 présente l'évolution de la contrainte dans le cas des chargements de fatigue-relaxation de l'acier 316L(N) (tôle SQ) à 823K pour une amplitude de déformation totale $E = \pm 0.3\%$ et différents temps de maintien en traction, t_h . Les boucles de contrainte-déformation pour le 2^{ème} et le 1000^{ème} sont représentées sur la Figure 5.24.

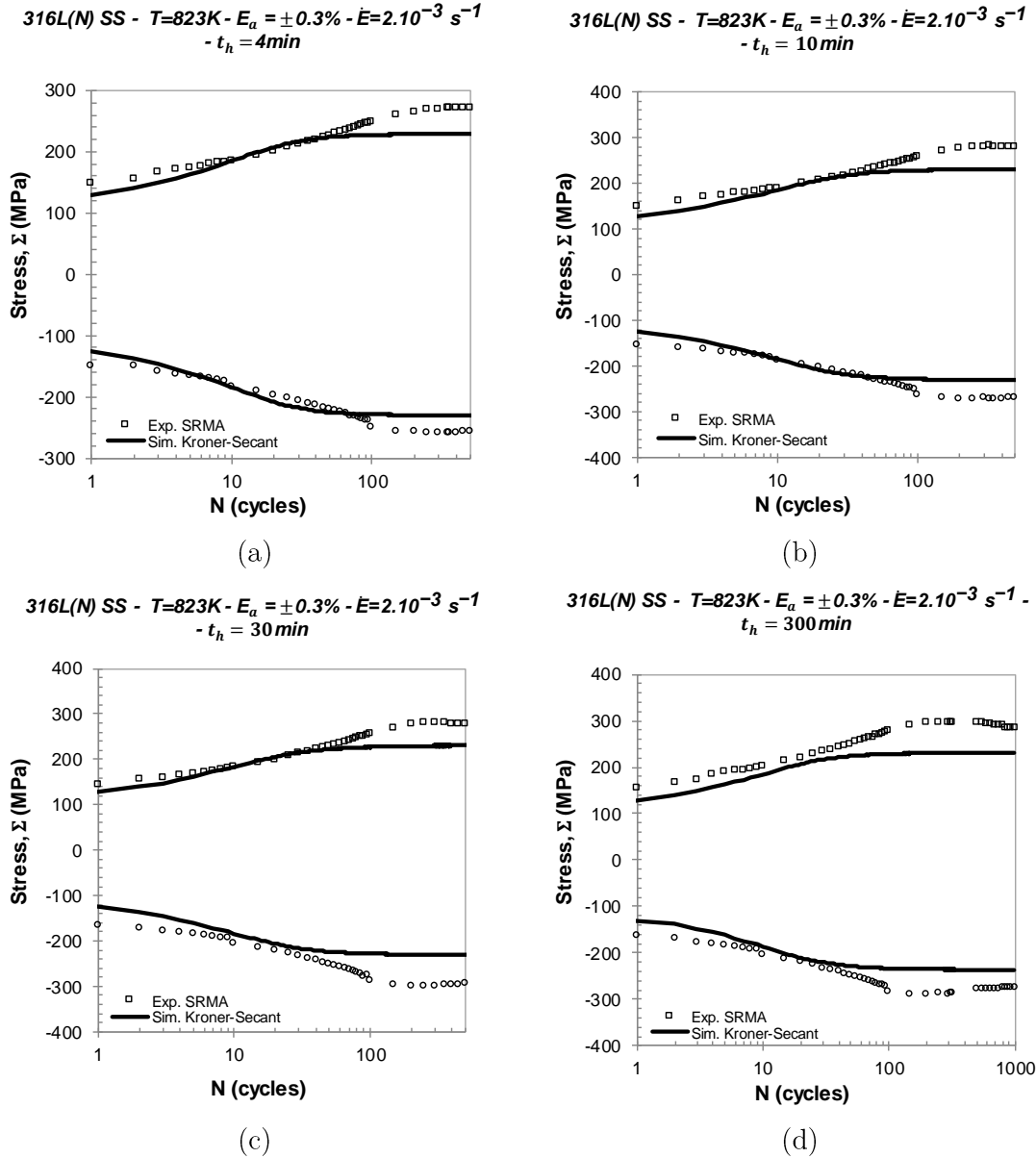


Figure 5.23 Évolution de la contrainte pour des essais de fatigue-relaxation, à 823K et $E = \pm 0.3\%$ pour des temps de maintien en traction de : (a) $t_h = 4 \text{ minutes}$, (b) $t_h = 10 \text{ minutes}$, (c) $t_h = 30 \text{ minutes}$ et (d) $t_h = 300 \text{ minutes}$.

« Evolution of the stress under fatigue-relaxation, at 823K and $E = \pm 0.3\%$ for holding times in tension of: (a) $t_h = 4 \text{ minutes}$, (b) $t_h = 10 \text{ minutes}$, (c) $t_h = 30 \text{ minutes}$ and (d) $t_h = 300 \text{ minutes}$. »

Un bon accord est observé entre les calculs et les résultats expérimentaux pour les premiers 50 cycles. Au-delà, un durcissement additionnel du matériau est observé expérimentalement par rapport aux essais de fatigue pure (cf. Section 1.4.5). Le modèle proposé ne permet pas

de rendre compte de ce phénomène aux courts temps de maintien (Figure 5.25). Ce comportement est également observé sur les boucles contrainte-déformation. Le modèle proposé permet de bien reproduire la forme des deuxièmes cycles, tandis que l'amplitude de contrainte au cycle $N=1000$ est sous-estimée.

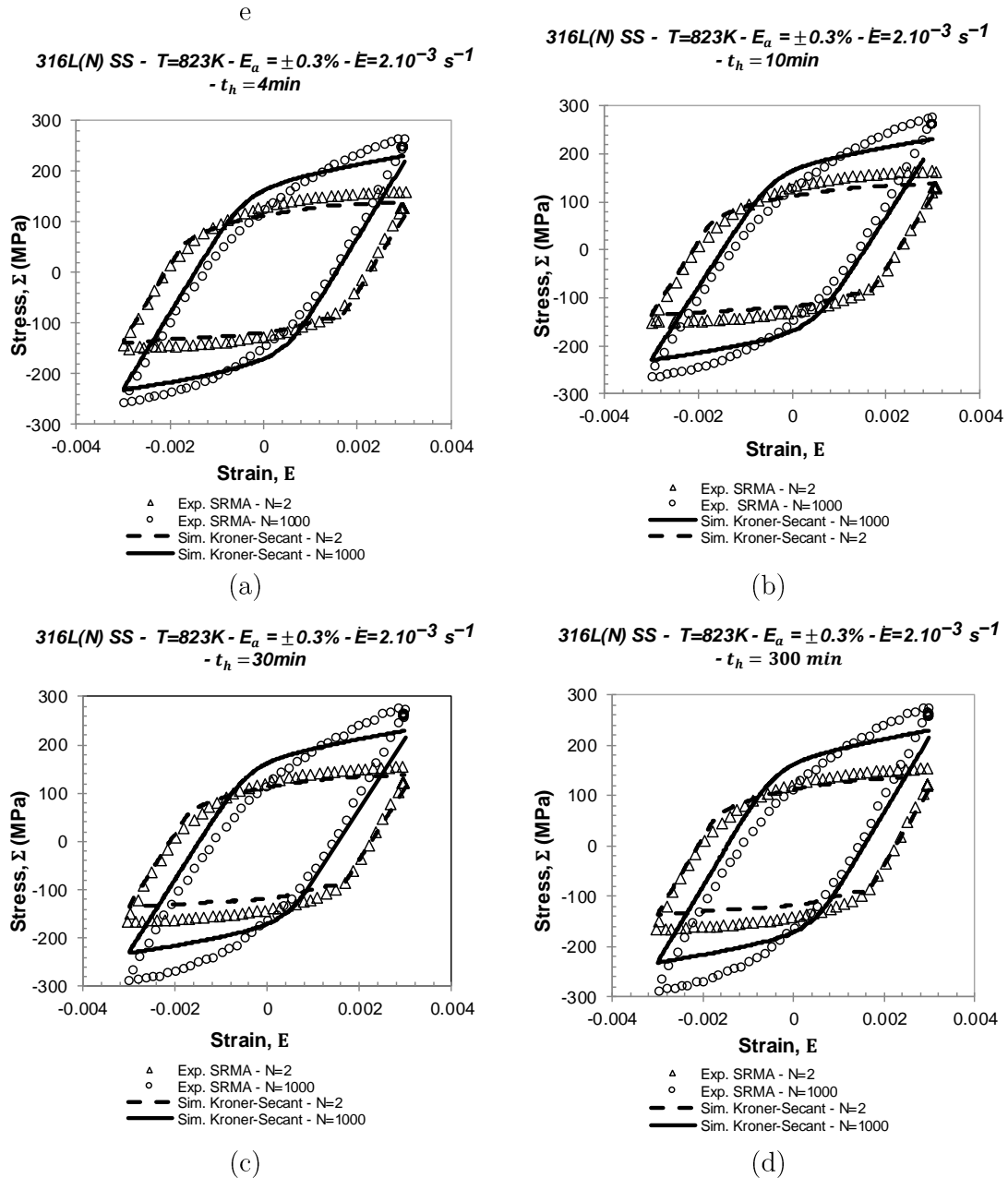


Figure 5.24 2^{ème} et 1000^{ème} boucles contrainte-déformation des essais de fatigue-relaxation, à 823K et $E = \pm 0.3\%$ pour des temps de maintien en traction de : (a) $t_h = 4$ minutes, (b) $t_h = 10$ minutes, (c) $t_h = 30$ minutes et (d) $t_h = 300$ minutes.

« 2nd and 1000th stress-strain loops of fatigue-relaxation tests, at 823K under $E = \pm 0.3\%$ for different holding times in the tensile peaks : (a) $t_h = 4$ minutes, (b) $t_h = 10$ minutes, (c) $t_h = 30$ minutes and (d) $t_h = 300$ minutes. »

316L(N) SS - $T=823K$ - $E_a = \pm 0.3\%$ - $\dot{E}=2.10^{-3} s^{-1}$

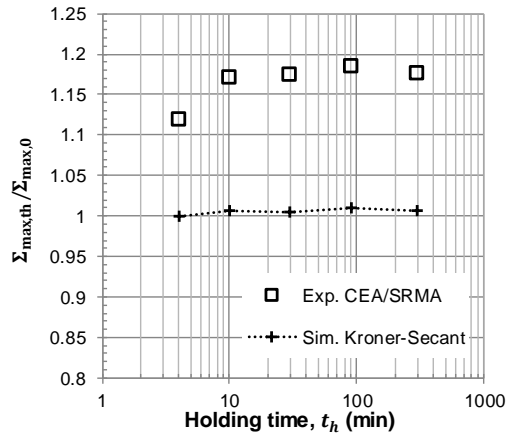


Figure 5.25 Rapport entre les contraintes maximales (traction) sous temps de maintien, t_h , ($\Sigma_{max,th}$) et sans temps de maintien ($\Sigma_{max,0}$), tracé en fonction du temps de maintien. Acier 316L(N) à 823K et $E = \pm 0.3\%$ [137].

« Ratio between tensile peak stress with hold time ($\Sigma_{max,th}$) and without hold time ($\Sigma_{max,0}$) plotted against hold time. 316L(N) SS, 823K and $E = \pm 0.3\%$ [137]. »

Pour des faibles temps de maintien ($t_h < 30$ minutes), l'évolution de la contrainte prédite par le modèle à la fin de la relaxation de chaque cycle ($\Sigma_{relax}(N) = \Sigma_{traction}(N) - \Sigma_{th}(N)$) est en bon accord avec les résultats expérimentaux (Figure 5.26.a-c). Pour des temps de maintien plus élevés, un écart plus important entre les prédictions et les mesures expérimentales est observé (Figure 5.26.d).

Il est intéressant de noter que, dans le cas de la fatigue-relaxation à 823K et $E = \pm 0.3\%$, la valeur de la contrainte relaxée tend à diminuer en fonction du nombre de cycles. C'est ce comportement est lié au fort durcissement cyclique observé pour cet alliage. Au premier cycle, l'amplitude de déformation viscoplastique est plus grande qu'au cycle stabilisé. Cela résulte dans une contrainte visqueuse aussi plus grande, favorisant ainsi la relaxation de la contrainte.

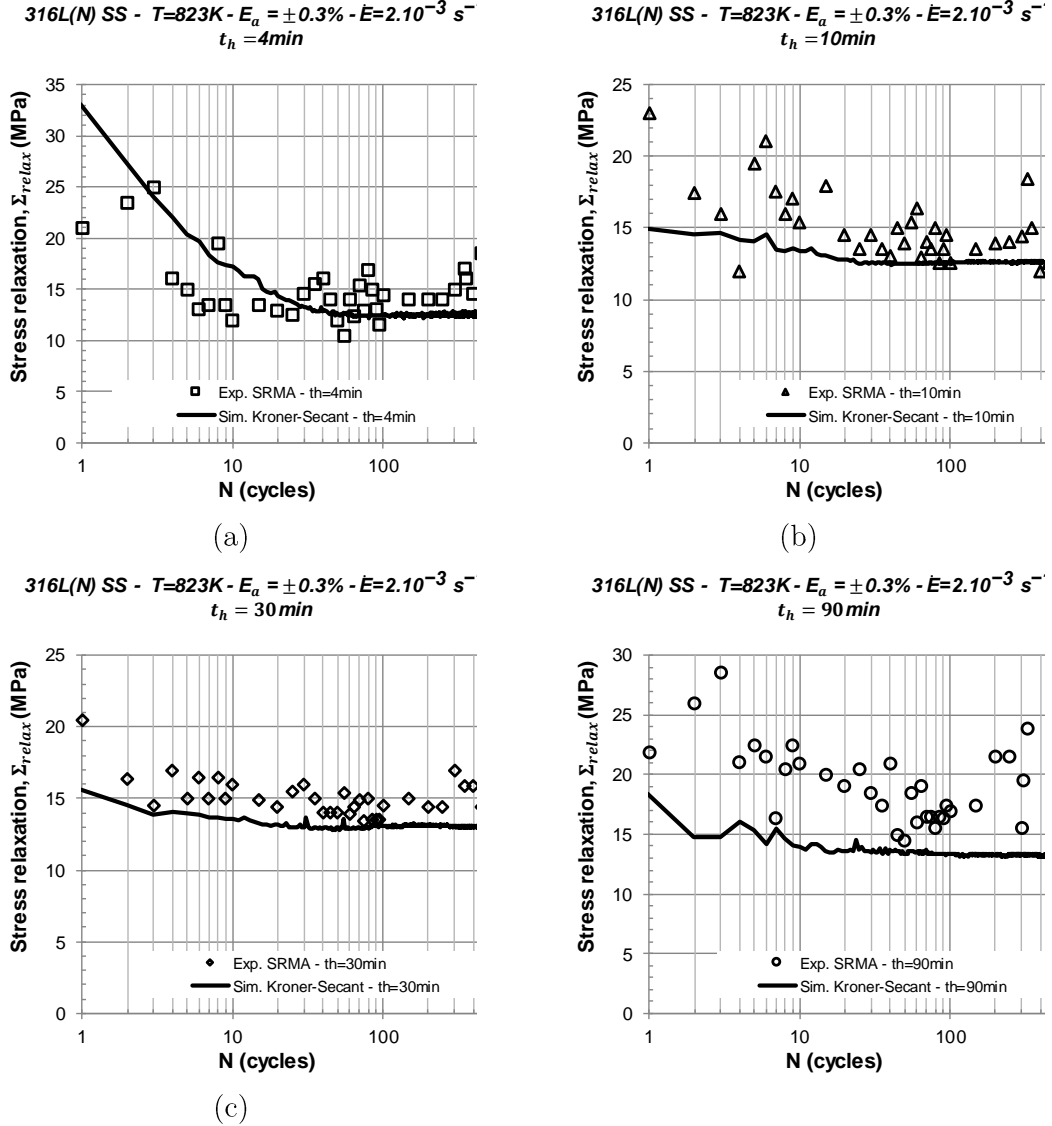


Figure 5.26 Évolution de la contrainte relaxée ($\Sigma_{relax} = \Sigma_{traction} - \Sigma_{th}$). Essais de fatigue-relaxation, à 823K et $E = \pm 0.3\%$ pour des temps de maintien en traction de : (a) $t_h = 4$ minutes, (b) $t_h = 10$ minutes, (c) $t_h = 30$ minutes et (d) $t_h = 90$ minutes.

« Stress relaxation ($\Sigma_{relax} = \Sigma_{traction} - \Sigma_{th}$) evolution. Fatigue-relaxation test, at 823K, under $E = \pm 0.3\%$ for different holding times in the tensile peaks : (a) $t_h = 4$ minutes, (b) $t_h = 10$ minutes, (c) $t_h = 30$ minutes and (d) $t_h = 300$ minutes. »

Dans le cas de chargements à plus fortes amplitudes de déformation, la contrainte visqueuse à la fin de la mise en charge tend à augmenter. Il est donc intéressant de comparer la réponse du modèle sur ce type de chargement. La Figure 5.27a présente l'évolution en fonction du nombre de cycle des pics de contrainte pour un chargement en fatigue-relaxation à 873 K, dans le cas d'une forte amplitude de déformation, $E_a = \pm 0.6\%$, et un long temps de maintien, $t_h = 4000$ minutes ($\sim 2,8$ jours). Comme dans le cas des chargements à plus faible amplitude de déformation cyclique, le modèle sous-estime l'évolution de la contrainte.

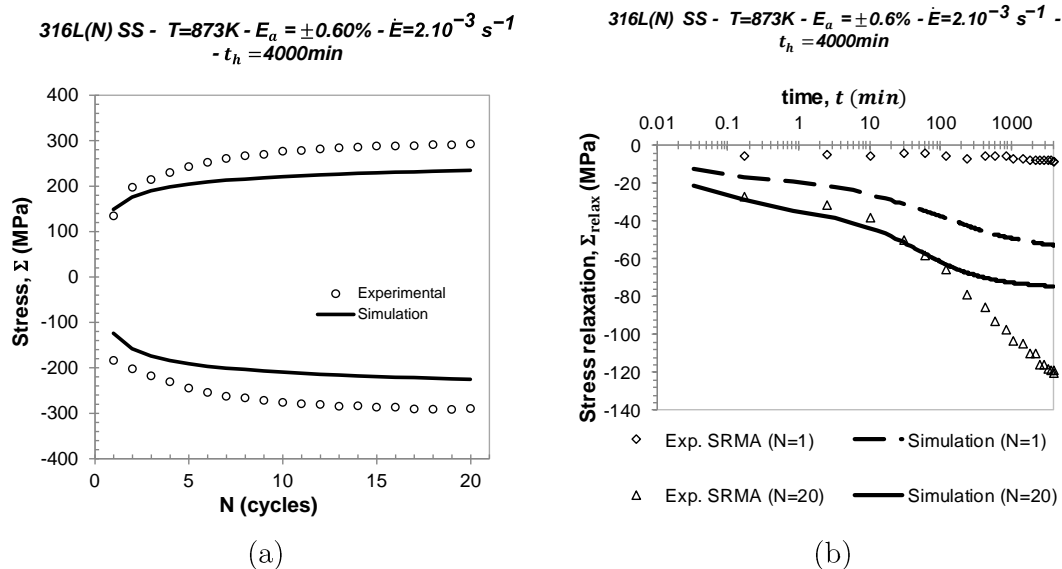


Figure 5.27 Essai de fatigue-relaxation, à 873K, $E = \pm 0.6\%$ et $t_h = 4000$ minutes. (a) Evolution des pics de contrainte. (b) Évolution de la contrainte relaxée pendant le temps de maintien à différents cycles.

« Fatigue-relaxation, at 873K, $E = \pm 0.6\%$ and $t_h = 4000$ minutes. (a) Evolution of stress peaks. (b) Evolution of the stress relaxation during the holding time at different cycles. »

L'évolution de la relaxation en fonction du temps pendant le maintien au 1^{er} et au 20^{ème} cycle est présentée à la Figure 5.27b pour le chargement considéré ($E = \pm 0,6\%$, $th = 4000min$, $T = 873K$). La relaxation au premier cycle est surestimée par le modèle. Curieusement, une très faible relaxation est observée expérimentalement lors du premier cycle. Une surestimation de la prédiction des densités des dipôles et boucles prismatiques lors de la première montée en charge pourrait expliquer ce comportement, de façon à augmenter l'effet de la restauration. Toutefois, la relaxation observée expérimentalement augmente fortement avec le nombre de cycles. Au 20^{ème}, le modèle sous-estime la forte relaxation observée expérimentalement au-delà d'un temps de relaxation de 100 minutes. Ce comportement est également curieux, étant donné la surestimation de la contrainte relaxée prédite le modèle lors de la traction-relaxation pour un temps de maintien encore plus long. Des analyses microstructurales se font nécessaires pour une meilleure compréhension des mécanismes présents dans cette condition.

Selon les prédictions du modèle, les densités des dipôles-coins et de boucles prismatiques présentées à la Figure 5.28 diminuent lors du temps de maintien. Cette chute de la densité de dipôles-coins et des boucles prismatiques coïncide avec la forte relaxation de la contrainte observée durant les premières minutes de la relaxation. Lorsque la densité de dipôles se stabilise, la vitesse de relaxation est fortement réduite. Il est à noter, que le temps caractéristique de la montée des dislocations prédit par le modèle est en accord avec les observations de Tavassoli [154] sur un même type de chargement estimé à $t = 90$ minutes.

Lors des essais de fatigue-relaxation à plus long temps de maintien, Sauzay et al. [137] ont mesuré des densités de dislocations entre $3 \cdot 10^{13} \text{ m}^{-2}$ et $1.4 \cdot 10^{14} \text{ m}^{-2}$. Ces valeurs sont en bon accord avec la densité de dislocations prédite par le modèle, pour ce type d'essai.

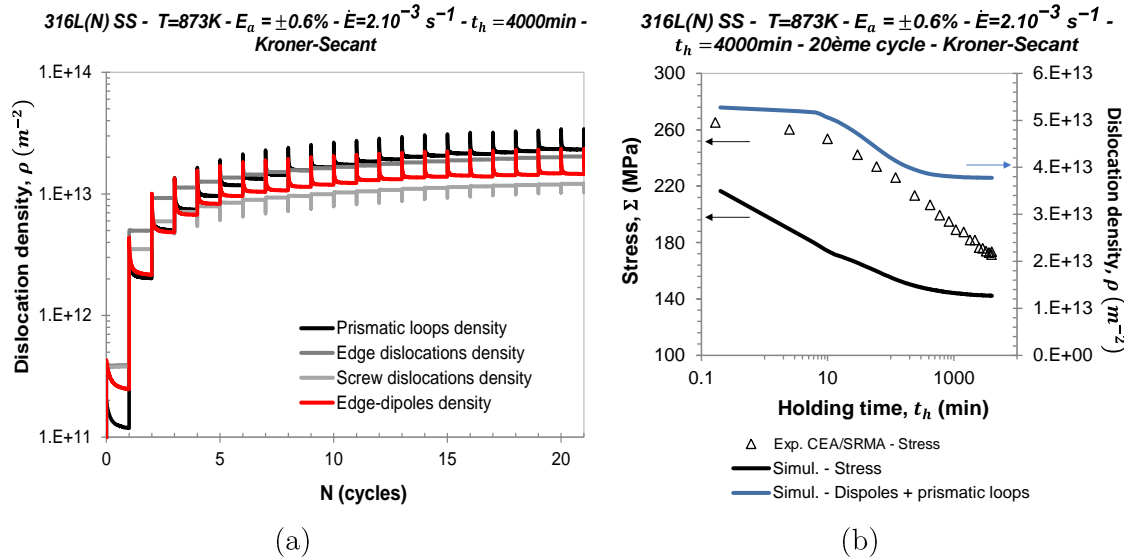


Figure 5.28 (a) Évolution de la densité de dislocations en fonction du nombre de cycles pour un essai de fatigue-relaxation, à 873K , $E = \pm 0.6\%$ et $t_h = 4000$ minutes. (b) Comparaison entre l'évolution de la contrainte et la densité de dislocations prédites pendant la relaxation au 20^{me} cycle.

« Evolution of dislocation density for a fatigue-relaxation test at 873K , $E = \pm 0.6\%$ and $t_h = 4000$ minutes. (b) Comparison between the stress stress and the dislocation density predicted during the relaxation at the 20^{th} cycle. »

Dans le cadre de notre modèle, nous considérons que les cellules de dislocations sont distribuées de façon simplifiée et homogène dans les grains. La prise en compte de la distribution des dislocations dans une phase dure et molle pourrait résulter dans une description plus précise du durcissement de la fatigue relaxation.

En effet, Pham et al. [134] ont montré que, pour l'acier 316L(N) sous déformation cyclique ($E = \pm 0.7\%$) à température ambiante, le pic de l'amplitude de contrainte est observé dans le cas d'une microstructure de dislocation homogène. À la fin du chargement, lorsqu'une microstructure hétérogène se développe, l'amplitude de contrainte décroît. Selon ces auteurs, la formation de cette microstructure de dislocations serait à l'origine de l'adoucissement cyclique observé pour ce matériau à température ambiante. Dans le cas de la fatigue-relaxation à température élevée, le mécanisme inverse serait à l'origine du durcissement additionnel : la microstructure hétérogène, observée depuis les premiers cycles en déformation cyclique, serait de plus en plus homogène lors des temps de maintien, résultant dans le durcissement additionnel observé. Le flux de dislocations entre les phases dures et molles pourrait permettre une meilleure description du durcissement cyclique. L'application d'un tel modèle, dit « biphasée », est en cours d'implémentation. Dans ce cas, l'application de contraintes intragranulaires à longue-portées se font aussi nécessaires [194].

5.5.4 Essais de symétrisation

Des essais cycliques à déformation imposée non-symétrique ont été réalisés sur l'acier 316L(N) (tôle SQ) à 823 et 873K au CEA/SRMA. Dans ce cas, la contrainte moyenne introduite peut diminuer au cours du cyclage, vers une valeur nulle, conduisant à la symétrisation de la contrainte. La Figure 5.29 présente l'évolution des contraintes minimale, Σ_{min} , maximale, Σ_{max} , et moyenne, Σ_m , en fonction du nombre de cycles pour un chargement en déformation cyclique entre une déformation nulle et une déformation maximale, $E = 0.4\%$ à 823K. Les prédictions pour le modèle de Kröner et Kröner-Secant sont tracées. En accord avec les résultats expérimentaux, le modèle prédit une symétrisation quasiment complète dès les premiers cycles. Comme pour les essais de fatigue à déformation imposée symétrique ($R=-1$), l'évolution de la contrainte est en bon accord avec les résultats expérimentaux.

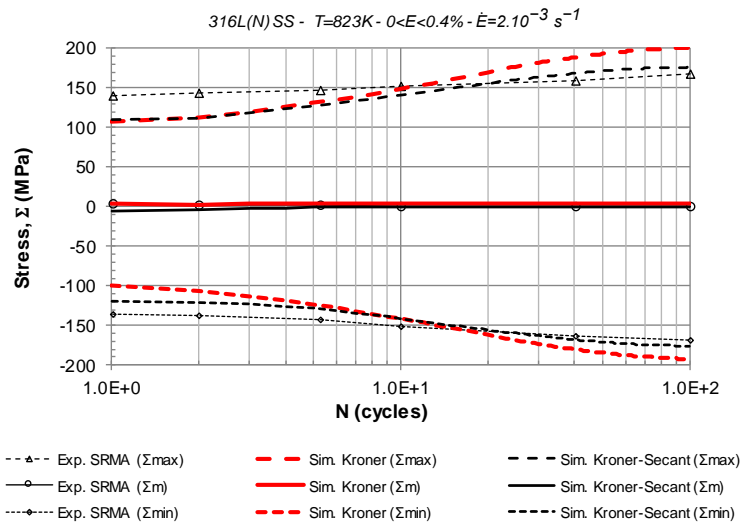


Figure 5.29 Évolution des contraintes de pic et de la contrainte moyenne en fonction du nombre de cycles pour des chargements de déformation cyclique non-symétrique à 823K, $0 < E < 0.4\%$.

« Peak stress and mean stress evolutions for a non-symmetric cyclic deformation at 823K, $0 < E < 0.4\%$. »

Le coefficient de symétrisation est défini par le rapport entre l'amplitude de contrainte, $\Delta\Sigma$, et la valeur absolue de la contrainte maximale observée au cycle stabilisé.

$$K_s = \frac{\max(|\Sigma_{max}|, |\Sigma_{min}|)}{\Delta\Sigma} \quad \text{Équation 5.46}$$

Pour l'acier 316L(N), le RCC-MRx [17] propose une évolution du coefficient K_s en fonction de r , défini par : $r = \Delta Q/2 (R_{p0.2\%})_{min}$ où ΔQ représente l'amplitude de contrainte calculée élastiquement et $(R_{p0.2\%})_{min}$ la valeur minimale de la limite d'élasticité conventionnelle ($E_p = 0.2\%$). En absence de symétrisation (pour les faibles valeurs de ΔQ), le coefficient de symétrisation $K_s = 1$. Pour des valeurs plus élevées de ΔQ , ce coefficient tend vers 0.5 (symétrisation complète). Sur la Figure 5.30, il est comparé les coefficients de symétrisation prédits par le modèle avec ceux calculés en utilisant les données expérimentales, en fonction

du rapport $R = \Delta\Sigma / (2 \cdot R_{p0,2\%})$. Le modèle est en bon accord avec les données expérimentales. Les prédictions du modèle montrent le conservatisme de la courbe proposée par le code RCC-MRx pour l'acier 316L(N).

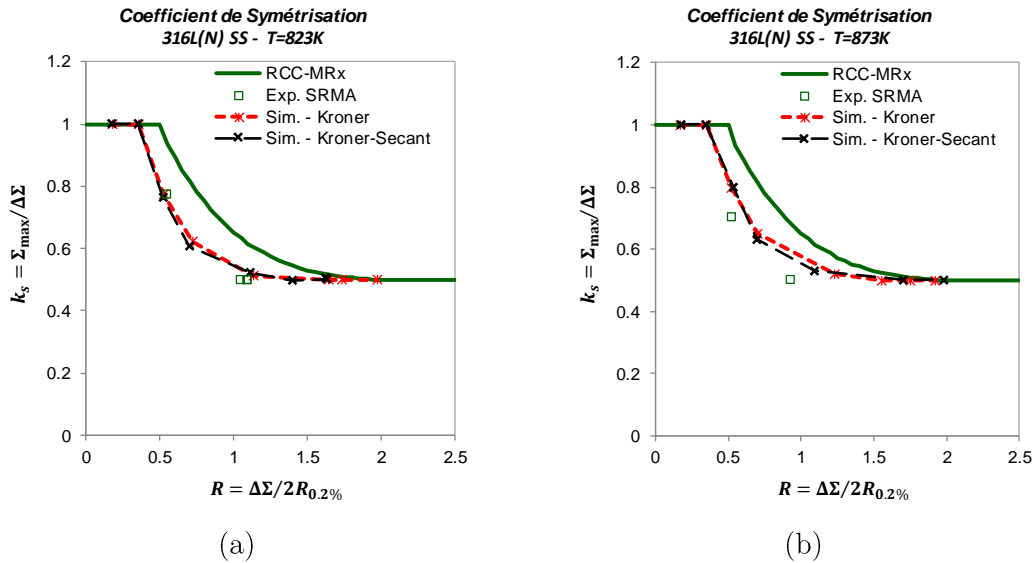
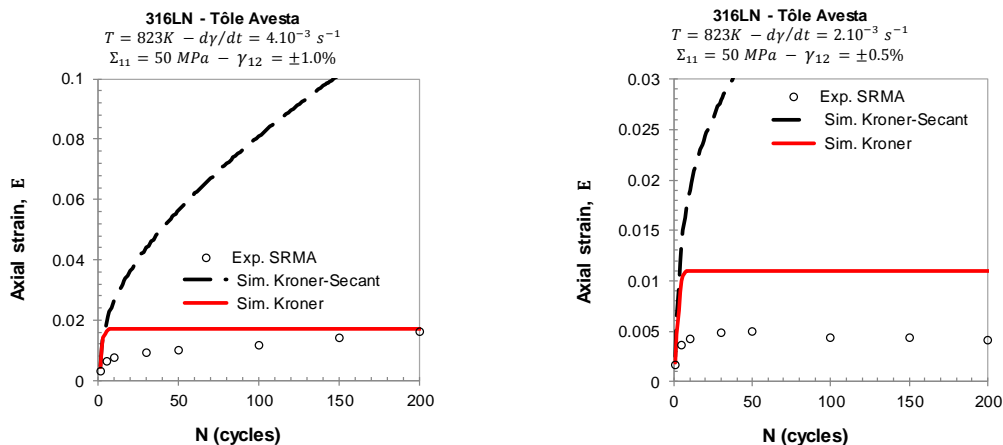


Figure 5.30 Comparaison entre les prédictions des modèles polycristallins, les résultats expérimentaux du CEA/SRMA et la règle de symétrisation proposé dans le code RCC-MRx [17].

« Comparison between the polycrystalline models predictions, the experimental results from CEA/SRMA and the symmetrization rule proposed in the RCC-MRx code [17]. »

5.5.5 Déformation progressive en traction-torsion (rochet 2D)

Des essais de déformation progressive en traction-torsion ont été réalisés pour l'acier 316L(N) à 823K (tôle AVESTA) au CEA/SRMA. Les courbes d'évolution de la déformation axiale en fonction du nombre de cycle pour différentes contraintes de traction ($\Sigma = 50 \text{ MPa}$, $\Sigma = 100 \text{ MPa}$ et $\Sigma = 150 \text{ MPa}$), à différentes amplitudes de cisaillement en torsion cyclique ($\pm\gamma_{12}$) sont présentées respectivement dans la Figure 5.31, Figure 5.32 et Figure 5.33. La Figure 5.34 présente l'évolution de l'amplitude de la contrainte de cisaillement en fonction du nombre de cycles, pour différentes contraintes de traction.

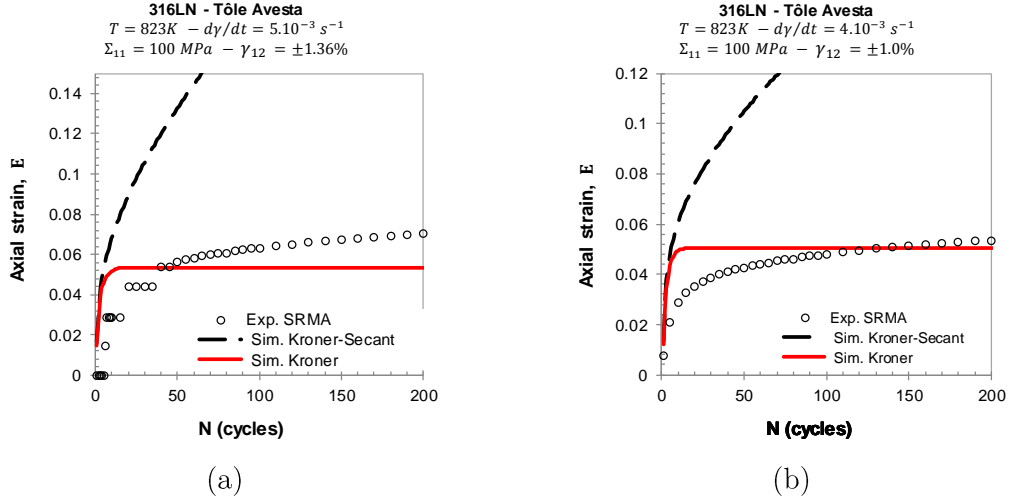


(a)

(b)

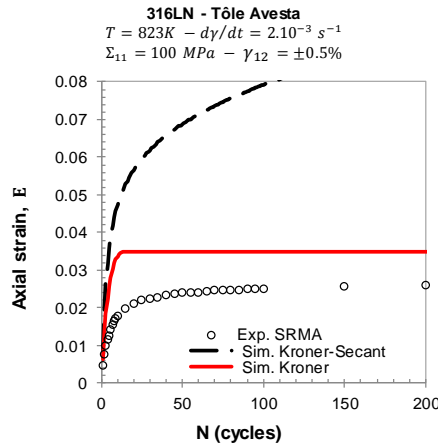
Figure 5.31 Essai de traction-torsion, pour une contrainte axiale $\Sigma = 50 \text{ MPa}$ à 823 K . (a) $\gamma_{12} = \pm 1.0\%$ et (b) $\gamma_{12} = \pm 0.5\%$.

« Tension-torsion tests. Axial stress $\Sigma = 50 \text{ MPa}$ at 823 K . (a) $\gamma_{12} = \pm 1.0\%$ and (b) $\gamma_{12} = \pm 0.5\%$. »



(a)

(b)



(c)

Figure 5.32 Essais en traction-torsion, pour une contrainte axiale $\Sigma = 100 \text{ MPa}$ à 823 K . (a) $\gamma_{12} = \pm 1.36\%$, (b) $\gamma_{12} = \pm 1.0\%$ et (c) $\gamma_{12} = \pm 0.5\%$.

« Tension-torsion tests. Axial stress $\Sigma = 100 \text{ MPa}$ at 823 K . (a) $\gamma_{12} = \pm 1.36\%$, (b) $\gamma_{12} = \pm 1.0\%$ et (c) $\gamma_{12} = \pm 0.5\%$. »

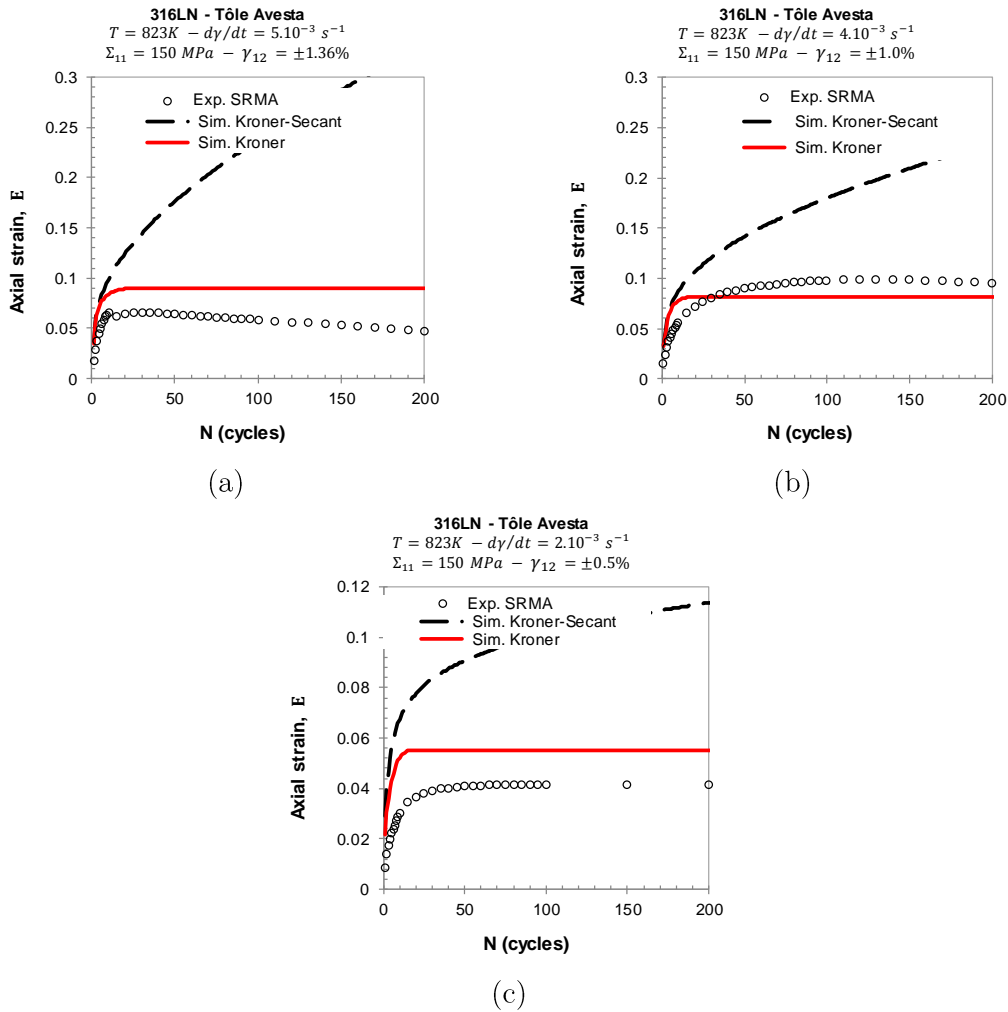


Figure 5.33 Essais en traction-torsion, pour une contrainte axiale $\Sigma = 150 MPa$ à $823 K$. (a) $\gamma_{12} = \pm 1.36\%$, (b) $\gamma_{12} = \pm 1.0\%$ et (c) $\gamma_{12} = \pm 0.5\%$.

« Tension-torsion tests. Axial stress $\Sigma = 150 MPa$ at $823 K$. (a) $\gamma_{12} = \pm 1.36\%$, (b) $\gamma_{12} = \pm 1.0\%$ et (c) $\gamma_{12} = \pm 0.5\%$. »

Dans tous les cas étudiés, le modèle Kröner-Secant surestime la déformation progressive. La déformation progressive prédite par le modèle Kröner, est du même ordre de grandeur que la déformation axiale expérimentale. Toutefois, ce modèle prédit une accommodation viscoplastique au bout de quelques cycles pour tous les chargements appliqués alors qu'expérimentalement, la stabilisation intervient pour un plus grand nombre de cycles. Ce comportement peut être lié à la cinétique de durcissement prédite par le modèle, qui est plus rapide que celle observé expérimentalement. En ce qui concerne l'amplitude de la contrainte de cisaillement cyclique, les prédictions des deux modèles sont en bon accord avec les résultats expérimentaux. Curieusement, l'amplitude de contrainte prédite par le modèle Kröner-Secant est supérieure à celle prédite par le modèle de Kröner. Une validation du modèle Kröner-Secant, pour ce type de chargement, par rapport aux calculs en éléments-finis se fait nécessaire pour une meilleure analyse des ces résultats.

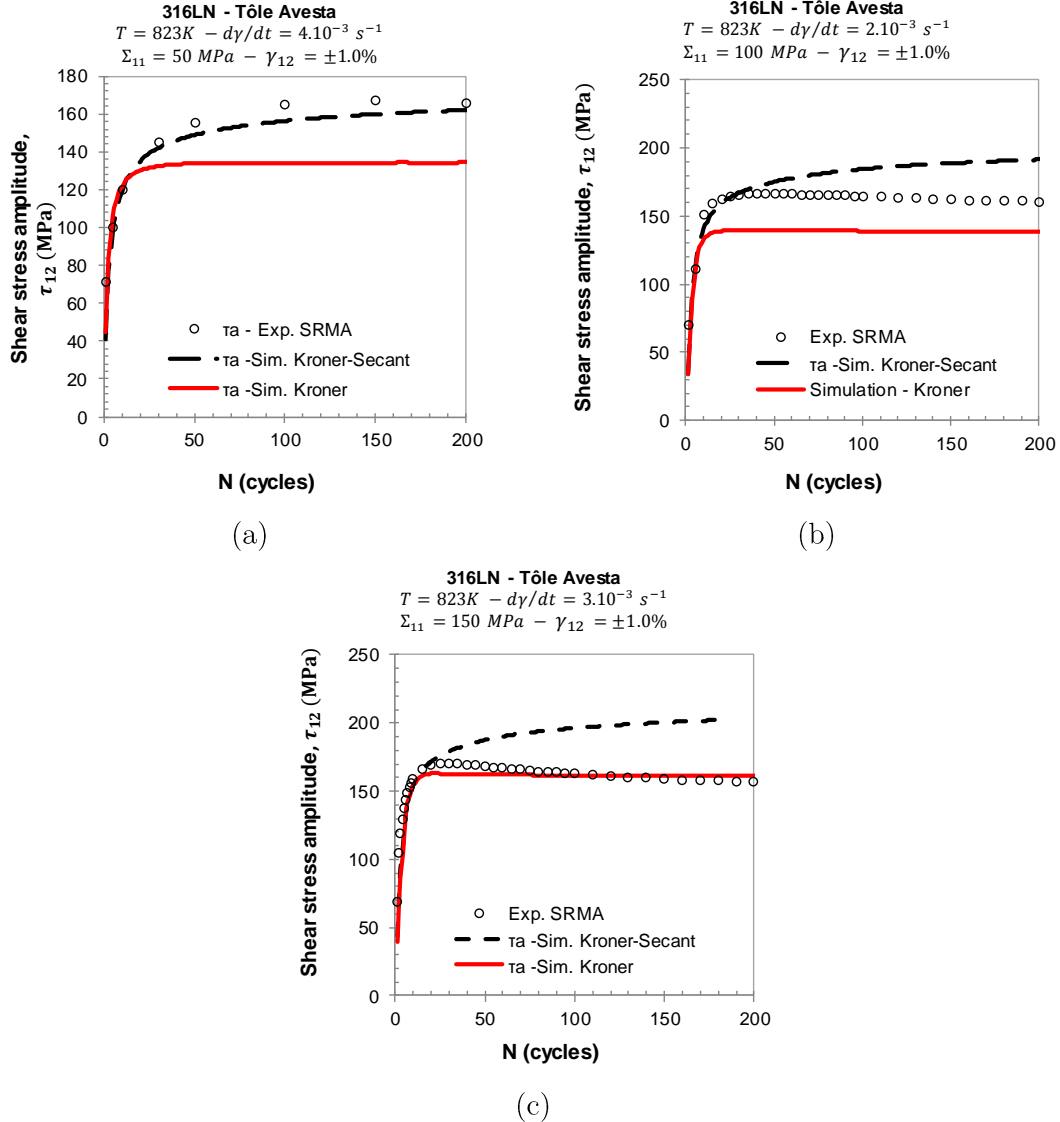


Figure 5.34 Essais en traction-torsion, $\gamma_{12} = \pm 1.0\%$, à 823 K. (a) $\Sigma_{11} = 50 MPa$ (b) $\Sigma_{11} = 100 MPa$ et (c) $\Sigma_{11} = 150 MPa$.

« Tension-torsion tests. Axial stress $\gamma_{12} = \pm 1.0\%$, at 823 K. (a) $\Sigma_{11} = 50 MPa$ (b) $\Sigma_{11} = 100 MPa$ et (c) $\Sigma_{11} = 150 MPa$. »

Pour éviter de déformations progressives trop élevées, le code RCC-MRx [17] propose la règle du diagramme d'efficacité. Le principe de cette règle repose sur la définition d'une contrainte efficace, P_{eff} . La contrainte efficace est la contrainte équivalente qui appliquée seule donnerait la même déformation que celle produite par la combinaison de la contrainte maintenue et de la contrainte cyclique. Pour cela, le chargement est caractérisé par un index d'efficacité, $V = P/P_{eff}$, et par un taux de secondarité, défini par $\Delta Q/P$, où P est la contrainte en traction et ΔQ est la variation de contrainte secondaire. Le diagramme d'efficacité du RCC-MRx pour les aciers inoxydables est présenté sur la Figure 5.35. Ce diagramme a été établi à partir d'un grand nombre d'essai en déformation progressive. Les résultats des essais de traction-torsion et les prédictions du modèle en utilisant la loi de

changement d'échelle de Kröner pour les chargements correspondants sont également représentés pour comparaison.

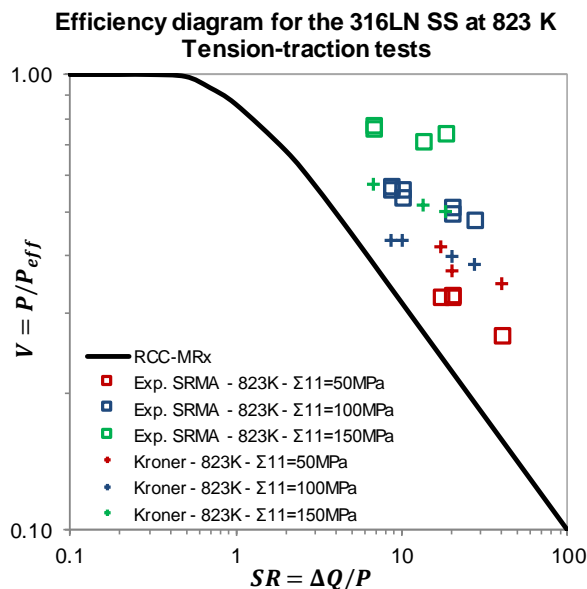


Figure 5.35 Diagramme d'efficacité. Comparaison entre les prédictions, les résultats expérimentaux et la règle proposée dans le code RCC-MRx.

« Efficiency diagram. Comparison between the model predictions, the experimental measurements and the rule proposed by the RCC-MRx code »

La contrainte primaire efficace prédite par le modèle est plus élevée que la contrainte primaire efficace expérimentale. Pour autant, le modèle peut permettre de définir une courbe moins conservatrice que la règle du diagramme d'efficacité actuellement utilisée dans le code RCC-MRx.

Comme cela a été discuté dans des chapitres précédents, la prédiction fiable de la déformation progressive est particulièrement difficile, car très sensible aux paramètres d'entrée et aux hypothèses de modélisation. Plusieurs facteurs jouent un rôle important sur l'incrément cyclique de déformation axial observé, comme par exemple l'équilibre entre les contraintes internes, le durcissement cyclique et l'effet de la viscosité [5]. La loi de changement d'échelle ayant un rôle très important. Avec un très faible nombre de paramètres ajustables, le modèle utilisant la loi de transition d'échelle de Kröner donne des prédictions en accord qualitatif avec les mesures expérimentales. Comme pour les essais de fatigue, nous observons que le modèle proposé conduit à une stabilisation plus précoce que l'expérience.

5.6 Étude de la sensibilité aux paramètres

La formation des structures de dislocations observées dans l'acier 316L(N) lors des chargements cycliques à température élevée est prise en compte dans le modèle par l'effet de similitude. Nous considérons que ces structures apparaissent dès que la densité de dipôles

et de boucles prismatiques atteint la condition $\rho_d + \rho_{PL} \geq 0.5\rho_t$. Les évolutions de la densité de dipôles-coins et de boucles prismatique sont pilotées par les distances d'annihilation des dislocations vis et coins, y_e et y_s . Selon Sauzay et Kubin [45], le coefficient de similitude permettant d'introduire la taille des cellules dans des différents métaux CFC analysés, varie entre $2.9 \leq K_{sim} \leq 3.4$. Dans les calculs précédents, la valeur moyenne de ce coefficient a été utilisée pour prédire le comportement cyclique.

Nous proposons d'évaluer l'effet de l'incertitude ces paramètres sur la prédiction du comportement cyclique de l'acier 316L(N). L'évolution de l'amplitude de contrainte en fonction du nombre de cycles dans le cas d'une déformation $E = \pm 0.6\%$ à $T = 823 K$ est choisie comme référence. L'effet du coefficient de similitude sur les courbes de durcissement cyclique est présenté à la Figure 5.36a pour des valeurs du coefficient de similitude variant dans le domaine proposé par Sauzay et Kubin [45]. L'effet du seuil d'apparition des structures de dislocations, défini par le rapport $(\rho_d + \rho_{PL})/\rho_t$ sur le durcissement cyclique est indiqué sur la Figure 5.36b.

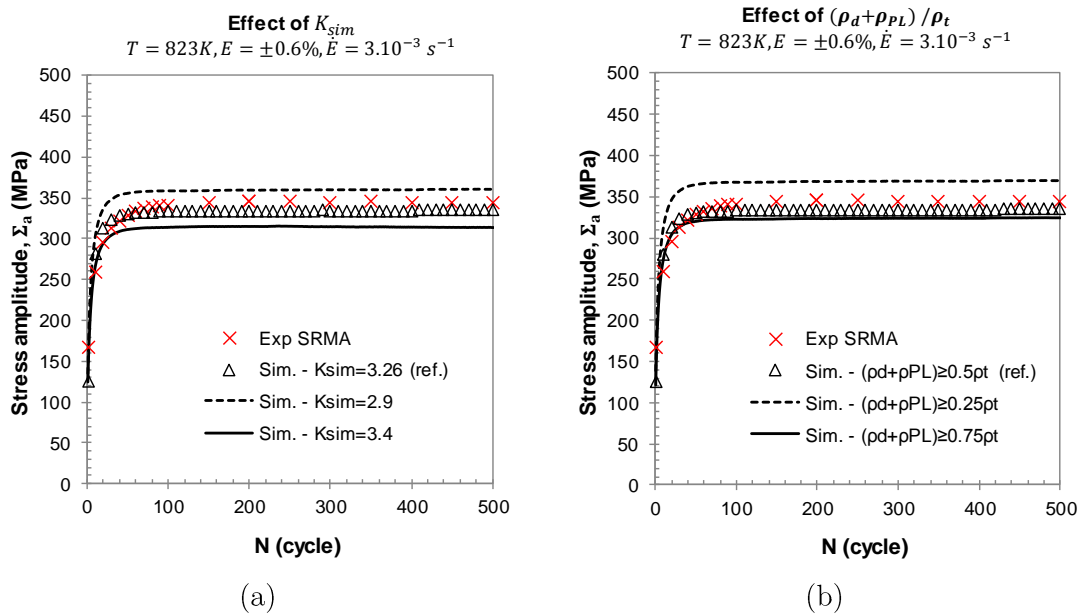


Figure 5.36 (a) Effet du coefficient de similitude, K_{sim} , et (b) de la valeur critique coefficient du rapport $(\rho_d + \rho_{PL})/\rho_t$ sur le comportement en déformation cyclique à $E = \pm 0.6\%$ et $T = 823 K$.

« (a) Effect of similitude coefficient, K_{sim} , and (b) of critical value coefficient of the ratio $(\rho_d + \rho_{PL})/\rho_t$ on the cyclic deformation behavior at $E = \pm 0.6\%$ and $T = 823 K$ »

Comme attendu, une diminution du coefficient de similitude, qui se traduit par une diminution de la taille des cellules, résulte dans une augmentation de la densité de dislocation et donc du durcissement cyclique. L'application du coefficient de similitude le plus faible du domaine d'incertitude ($K_{sim} = 2.9$) augmente l'amplitude de contrainte au cycle stabilisé de l'ordre de 7%. La différence entre le courbe de référence et celle calculé avec un coefficient de similitude plus grand ($K_{sim} = 3.4$) est de l'ordre de -6%. L'utilisation d'un seuil d'apparition des structures de dislocations $(\rho_d + \rho_{PL})/\rho_t$ plus faible que 0,5

amplifie le durcissement cyclique. Une variation de $\pm 50\%$ de ce seuil par rapport à la valeur de référence entraîne une différence d'amplitude de contrainte au cycle stabilisé entre 10% et -3%. Il est important de noter que le libre parcours moyen, défini par la plus petite grandeur entre la taille de grains, la distance entre les obstacles et la taille des cellules, sera déterminé par ce dernier terme pour un chargement cyclique après quelques cycles. L'amplitude de contrainte au cycle stabilisé ne dépendra donc pas de la taille de grains ou des coefficients d'interaction entre systèmes de glissement.

L'effet des distances critiques d'annihilation des dislocations coins et vis sur le durcissement cyclique est présenté sur la Figure 5.37. Ces deux paramètres sont très importants, car ils impactent les mécanismes d'annihilation des dislocations mobiles, la production et annihilation des dipôles et boucles prismatiques. Par conséquence, ces paramètres ont aussi un effet sur la formation des structures cellulaires.

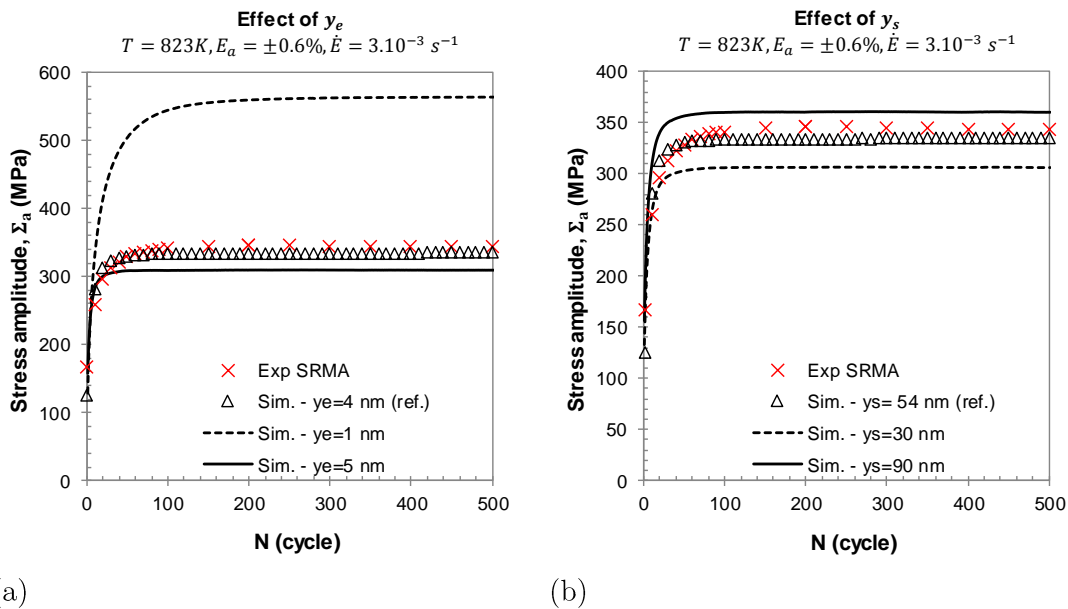


Figure 5.37 (a) Effet de la distance critique d'annihilation des dislocations (a) coins, y_e , et (b) vis, y_s , sur le comportement en fatigue à $E = \pm 0.6\%$ et $T = 823 K$

« (a) Effect of the critical annihilation distance of (a) edge, y_e , and (b) screw, y_s , dislocations on the cyclic deformation behavior at $E = \pm 0.6\%$ and $T = 823 K$ »

A 823K, la valeur de référence $y_e = 4 nm$ a été déterminé expérimentalement par MET [35]. Les calculs en dynamique moléculaire estiment que les distances critiques d'annihilation de dislocation coins dans le Cuivre et l'Aluminium sont respectivement de l'ordre de 0.42 nm et 1.6 nm [239]. En appliquant une valeur $y_e = 1 nm$, l'amplitude de contrainte calculée au cycle stabilisé est plus élevée que celle de la courbe référence. L'écart observé est de l'ordre de 65%. Pour une valeur, $y_e = 5 nm$, l'amplitude de contrainte diminue en 10%.

En ce qui concerne la distance d'annihilation des dislocations vis, y_s , aucune valeur expérimentale n'est disponible dans la littérature. La valeur de référence $y_s = 54 \text{ nm}$ a été déterminée à partir de l'Équation 5.41 et de l'Équation 5.43. Cependant, le modèle apparaît moins sensible à ce paramètre. Des différences de -9% et 8% sont observées sur l'amplitude de contrainte au cycle stabilisé par rapport à la référence respectivement pour $y_s = 30 \text{ nm}$ et $y_s = 90 \text{ nm}$.

Comme il a été montré, le paramètre y_e contrôle la cinétique du durcissement cyclique. Bien que les prédictions soient très sensibles à la distance d'annihilation des dislocations coins, y_e , les valeurs déterminées expérimentalement conduisent à des prédictions satisfaisantes. Des observations complémentaires peuvent être envisagées pour consolider les prédictions du modèle.

5.7 Conclusions

Un modèle polycristallin viscoplastique a été proposé pour décrire le comportement cyclique des aciers inoxydables austénitiques à haute température, entre 723 et 873K. À température ambiante (cf. Chapitre 3), les lois cristallines ont pris en compte la création et annihilation des dislocations mobiles, vis et coins, et la création et annihilation des dipôles-coins. Dans ce chapitre, nous avons ajoutés de mécanismes physiques observés aux températures élevée, tel que : la montée des dislocations, le vieillissement dynamique, la création et annihilation des boucles prismatiques et la formation de microstructures de dislocations cellulaires.

Les lois et les paramètres permettant de décrire ces mécanismes ont pu être déterminés, sur la base d'observations microstructurales ou grâce aux résultats issus des calculs en dynamique des dislocations, publiés depuis une quinzaine d'années. Ainsi, seuls trois paramètres doivent être ajustés par identification inverse à partir de courbes de traction à différentes températures et vitesses de chargement : les paramètres viscoplastiques et le paramètre lié à la contrainte du DSA. Ces paramètres directement liés à des mécanismes atomistiques, faisant intervenir les atomes de Fe, Cr, Ni, C, N, entre autres. L'identification de ces paramètres par des calculs numériques (dynamique moléculaire) reste encore inaccessible.

Les prédictions du modèle ont été comparées aux résultats d'essais réalisés dans une large gamme de sollicitation (relaxation, fatigue, fatigue-relaxation et déformation progressive). Les observations suivantes peuvent être retenues de cette évaluation :

- La prise en compte du DSA permet de bien prédire l'effet de sensibilité inverse à la vitesse de chargement lors des essais de traction dans le domaine de température considéré ;

- L'effet de la vitesse de mise en charge est également observé sur la relaxation de la contrainte. La prise en compte de la montée des dislocations permet rendre compte de la relaxation, mais la relaxation pendant de longs temps de maintien est sous-estimée ;
- En déformation cyclique, le fort durcissement cyclique observé pour ce matériau aux températures élevées est bien prédit par le modèle. Toutefois, une stabilisation plus rapide de la contrainte est prédite par le modèle. Le durcissement cyclique étant lié aux densités de dipôles-coins et de boucles prismatiques, ainsi que la formation d'une microstructure de dislocations bien développée. La forme des boucles de contrainte-déformation est également bien représentée. Toutefois, le durcissement cyclique additionnel observé expérimentalement en fatigue-relaxation est sous-estimé par le modèle ;
- En utilisant la loi de transition d'échelle de Kröner, la prédiction de la déformation progressive en traction-torsion, est en bon accord avec les données expérimentales. Toutefois, le modèle conduit à une stabilisation plus rapide de la déformation progressive que celle mesurée expérimentalement.

Des améliorations du modèle peuvent être envisagées à terme, notamment pour mieux prendre en compte les mécanismes de la relaxation aux longs temps de maintien, par le mécanisme d'arrêt progressif des dislocations, et de la fatigue-relaxation, par la prise en compte d'un modèle « biphasé ».

A viscoplastic polycrystalline model has been proposed to describe the behavior of 316L(N) SS at high temperature, between 723 and 873K. At the grain scale, this model is based on the evolution of different populations of dislocations densities: screw and edge mobile dislocations, edge-dipole and prismatic loops. Numerous physical mechanisms are taken into account: production and annihilation of dislocations, production and annihilation of edge-dipoles, dislocation climb, dynamic strain aging, production and annihilation of prismatic loops, formation of dislocation cell structures. The evolutions laws and the materials parameters describing such mechanisms could be determined from microstructural observations or discrete dislocation dynamics, published during the last fifteen years. Only three parameters must be adjusted from tensile curves at different temperatures and strain rates: the viscoplastic parameters (activation volume and activation energy) and the parameter related to the DSA stress. These parameters are directly related to atomistic mechanisms, involving Fe, Cr, Ni, C, N atoms, among others. The identification of these parameters by numerical calculations (molecular dynamics) is still inaccessible.

The predictions of the proposed model were compared with respect to experimental results carried out in a wide range of loading conditions (relaxation, fatigue, fatigue-relaxation and biaxial ratcheting). The following observations can be drawn from this evaluation:

- *The prediction of inverse rate sensitivity effect during tensile tests in the considered temperature range was possible by taking into account the DSA mechanism;*
- *The strain rate effect is also observed on the stress relaxation behavior. By taking into account the dislocation climb in dipoles, the model correctly accounts short-term stress relaxation, but relaxation during long holding time was underestimated;*
- *In cyclic deformation, the strong cyclic hardening observed in 316L(N) SS at high temperatures was well predicted by the model. The shape of the stress-strain hysteresis loops was also in good agreement with experimental data. However, the additional cyclic hardening observed under fatigue-relaxation, at short holding times is not correctly predicted by the model.*
- *Using the Kröner scale transition rule, the prediction of biaxial ratcheting strain leads to trends simulations to the experimental ones. However, the model leads to a saturation of the ratcheting strain quicker than the one measured experimentally.*

Improvements of the model are considered for future studies, in particular to better take into account the stress relaxation mechanisms observed at long holding times. Finally, the implementation of a two-phase model is in progress, in order to better describe the additional hardening observed under fatigue-relaxation.

Conclusions générales et perspectives

Notre objectif était de développer un modèle polycristallin, basé sur la description des mécanismes physiques de la déformation viscoplastique de métaux et alliages de structure cubique à faces centrées (CFC) et présentant un nombre de paramètres ajustables limité. Ce modèle vise, en particulier, à mieux décrire le comportement monotone et cyclique des aciers inoxydables austénitiques 316L(N) pour les besoins de dimensionnement des structures du circuit primaire des RNR-Na fonctionnant à haute température.

Une étude bibliographique détaillée de la viscoplasticité à l'échelle macroscopique et de l'évolution de la microstructure des dislocations de l'acier 316L(N) et d'autres métaux et alliages de structure CFC, tels que le Al, Ni, Cu, Cu-Al, Cu-Zn, etc., a permis de caractériser les principaux mécanismes physiques à prendre en compte dans le modèle selon la température. Une vaste base de données expérimentale sur laquelle appuyer la validation de nos travaux a ainsi pu être réunie. Une démarche progressive a été retenue pour le développement du modèle, afin de valider étape par étape, et d'en maîtriser le fonctionnement.

Lors de la première étape, nous avons sélectionné des lois de changement d'échelle, qui permettent de prédire le comportement du polycristal à partir de la description des glissements viscoplastiques actifs sur certains systèmes de glissement des grains. Trois lois de localisation auto-cohérents, d'implémentation numérique aisée, ont été considérées : la loi thermo-élastique proposée par Kröner, la loi élasto-viscoplastique additive de Mercier et Molinari et une nouvelle loi de localisation élasto-viscoplastique, développée dans le cadre de la thèse, appelée Kröner-Secant. Les prédictions des différents modèles auto-cohérents ont été comparées aux résultats obtenus par des calculs aux éléments-finis en champs complets qui ont été utilisés comme références.

La loi de localisation élasto-viscoplastique proposée, Kröner-Secant, permet une prédiction plus exacte du comportement élasto-viscoplastique des matériaux polycristallins. Pour les différents jeux de paramètres viscoplastiques cristallins testés, ce modèle a conduit à une prédiction plus précise des comportements macroscopiques monotone (traction, relaxation et fluage) et en déformation cyclique en comparaison avec les calculs aux éléments finis.

La validation sur chargements cycliques de déformation progressive s'est montrée plus délicate : les prédictions du modèle de Kröner sont en meilleur accord avec celles des éléments finis dans le cas des chargements à contrainte moyenne inférieures à 125 MPa. Toutefois, le modèle de Kröner-Secant a présenté des meilleures prédictions de l'évolution de la déformation viscoplastique pour des contraintes moyennes supérieures à cette valeur

de contrainte. Une forte sensibilité de la déformation progressive vis-à-vis du modèle de transition d'échelle est donc observée.

Pour une comparaison avec les résultats expérimentaux de rochet, habituellement obtenues aux faibles contraintes moyennes, le modèle auto-cohérent de Kröner a été préféré alors que le modèle de Kröner-Secant a été utilisé pour prédire le comportement élasto-viscoplastique des polycristaux métalliques, et notamment de l'acier inoxydable 316L(N).

Dans un deuxième temps, nous avons proposé un modèle basé sur une description à l'échelle du grain des différents mécanismes physiques de la déformation viscoplastique des métaux CFC au tour de la température ambiante. Des lois d'évolution des densités des dislocations mobiles vis et coins sont considérés, en prenant en compte les mécanismes de multiplication et annihilation des dislocations. L'évolution de la densité de dipôles-coins, considérés comme immobiles, est également introduite dans le modèle. Dans le cas des dipôles, les mécanismes de production et d'annihilation sont également présents. Des mesures expérimentales et des données issues de la dynamique des dislocations discrètes ont été utilisées comme paramètres d'entrées, permettant de réduire le nombre de paramètres ajustables par identification inverse. Les deux seuls paramètres à identifier sont le volume et l'énergie d'activation du glissement viscoplastique, qui ont été déterminés à partir d'essais de traction avec sauts de vitesse et à différentes températures, appliquées à des polycristaux. Ces paramètres liés à la viscosité sont dépendants de la composition chimique et pourraient à long-terme être estimées par des calculs atomistiques.

Ce modèle a été validé par comparaison à des résultats expérimentaux obtenus pour différents approvisionnements d'aciers 316L et 316L(N). Nous avons montré que le modèle décrit bien le comportement des polycristaux en traction monotone et en relaxation, ainsi que le comportement cyclique à température ambiante dans un large intervalle d'amplitude de déformation cyclique, entre $\pm 0,1\%$ et $\pm 0,8\%$. L'évolution de la densité des dislocations est également bien décrite. L'utilisation du modèle de changement d'échelle de Kröner, permet également de rendre compte de manière satisfaisante de la déformation progressive des aciers 316L et 316L(N) à température ambiante pour de nombreux chargements dont la contrainte moyenne, l'amplitude de contrainte et la vitesse de chargement.

Une spécificité du modèle était la partition des grains en deux familles : des grains en glissement simple et multiple. Le critère étant déterminé sur les observations de la microstructure de dislocations. Étant donné la sensibilité du modèle à cette partition en deux familles de grains, il est apparu pertinent d'introduire des améliorations du modèle afin de mieux prendre en compte les mécanismes observés expérimentalement. Tout d'abord, afin de mieux décrire l'effet de l'orientation cristalline sur le taux de production de dislocations, nous avons mis en œuvre un modèle additionnant la contribution des différents types d'interactions entre les systèmes de glissement. Cette modification a permis

de supprimer la partition du triangle standard, sans impact sur la description du comportement global du polycristal.

Toutefois, il a été montré que ce modèle n'est pas capable de décrire ni le faible nombre de systèmes activés observés dans les métaux et alliages à faible énergie de faute d'empilement ni l'effet de l'énergie de faute d'empilement sur l'effet Hall-Petch. Un modèle de changement d'échelle permettant de mieux rendre compte de la localisation de la déformation plastique dans des fines bandes de glissement observés lors d'un chargement monotone à température ambiante a donc été proposé. Pour ce modèle, l'inclusion d'Eshelby est appliqué sur la configuration d'une ellipsoïde isolée de type « penny-shape ». Les bandes sont considérées suffisamment longues et proches, pour que l'état de contraintes soit supposé homogène dans chaque grain. Contrairement aux modèles de transition d'échelles discutés précédemment (Kröner, Kröner-Secant, Mercier-Molinari), cette loi de localisation reposant sur des hypothèses simplifiées met en évidence l'activation d'un faible nombre de systèmes de glissement dans les métaux CFC, en accord avec les observations expérimentales. Les prédictions des courbes en traction monotone sont en bon accord avec les observations expérimentales. Par rapport aux autres modèles de transition d'échelle, le modèle des bandes de glissement permet de mieux rendre compte de l'effet de taille de grains (effet Hall-Petch) des métaux CFC couvrant un large domaine d'énergie de faute d'empilement.

Dans une dernière étape, les mécanismes observés à haute température lors de la déformation viscoplastique des aciers 316L(N) ont été introduits dans le modèle. Entre 723 et 923K, le vieillissement dynamique (dynamic strain aging - DSA), la montée des dislocations et la grande probabilité d'activation du glissement dévié jouent un rôle important sur le comportement mécanique du matériau. Les lois viscoplastiques cristallines proposées prennent en compte ces phénomènes, ainsi que l'apparition d'une structure de dislocations bien définie, différemment de ce qu'il est observé à température ambiante. Ces évolutions conduisent à introduire un troisième paramètre ajustable, lié à la contrainte induite par le DSA. Les trois paramètres, celui lié au DSA et les deux paramètres viscoplastiques, sont aisément identifiés sur la base d'essais de tractions réalisés à différentes températures et vitesses de déformation mettant en évidence l'effet de sensibilité inverse à la vitesse de chargement.

Le fort durcissement cyclique observé pour ce matériau aux températures élevées a été bien décrit par ce modèle étendu, ainsi que les boucles de contrainte-déformation. La prise en compte de la montée des dislocations a permis de décrire correctement la relaxation à court terme après un chargement monotone en traction. Cependant, le modèle conduit à surestimer la relaxation à long terme. Dans le cas de la fatigue-relaxation, le modèle ne permet pas de rendre compte du durcissement supplémentaire observé expérimentalement.

La prise en compte d'un modèle biphasé, avec un flux de dislocations entre les phases dures et molles, pourrait améliorer ces prédictions. Par contre, le modèle proposé permet de prédire raisonnablement la symétrisation et de la déformation progressive sous un chargement biaxial de traction-torsion de l'acier 316L(N) à température élevée. Pour ce dernier point, l'utilisation du modèle à champ-moyen de Kröner est privilégiée, en accord avec la validation initiale par comparaison aux calculs aux éléments finis.

Des voies de progrès et de développement du modèle proposé peuvent être tracées pour les études à venir. En particulier, il apparaît que la prise en compte du vieillissement dynamique dans le modèle doit être améliorée, pour une meilleure description de la déformation progressive et de la relaxation à long terme à température élevée. Un modèle d'arrêt progressif des dislocations, reprenant la démarche mise en œuvre au CEA pour le cas des aciers martensitiques (grade 91), peut-être envisagé pour l'acier 316L(N).

Pour ce qui concerne le comportement à température ambiante, la validation du modèle de transition d'échelle basé sur localisation de la déformation plastique dans des bandes de glissements proposé dans ce travail a été engagée avec une comparaison à des calculs aux éléments-finis en champs-complet. Les prédictions du modèle doivent être également être confrontées à des résultats expérimentaux sous des chargements cycliques.

Enfin, le modèle proposé doit être simplifié, de façon à permettre des calculs de structures en complément des modèles phénoménologiques actuellement utilisés. L'objectif à terme de ce modèle simplifié serait de simuler le comportement des structures des RNR-Na dans des conditions de chargements similaires à celles observées lors de leur fonctionnement.

The aim of this work was to develop a polycrystalline model, based on the description of the physical mechanisms of viscoplastic deformation of face centered-cubic (FCC) metals and alloys, presenting a reduced number of adjusted parameters. More precisely, this model will be applied on the prediction of the cyclic behavior of 316L(N) stainless steels (SS), in order to assist on the design conception of structural components in Sodium-cooled Fast Reactors (SFR).

A detailed literature review of the macroscopic viscoplasticity behavior and the evolution of the microstructure of dislocations in 316L(N) SS and other FCC metals and alloys, such as Cu, Al, Ni, Cu-Al, etc., was initially performed. From this review, it was possible to characterize the main physical mechanisms to be taken into account at different temperatures, and also to assemble a large experimental database, which was used as support to the model validation. A gradual approach has been adopted for the development of the model, to validate step by step, and to control its operation.

In a first step, we selected some scale transition laws, which allows the prediction of the polycrystal behavior from the description of viscoplastic slip observed in the crystalline slip systems. Three localization rules of straightforward implementation, based on self-consistent premises, were considered: the thermo-elastic rule proposed by Kröner, the elastic-viscoplastic rule of Mercier and Molinari and a new elastic-viscoplastic localization rule, developed in the framework of this thesis, called Kröner-Secant. The predictions of these self-consistent approaches were compared with the results obtained by full-field finite element (FE) calculations, which were used as a reference.

We have shown that the proposed elastic-viscoplastic localization rule, Kröner-Secant, allows a more accurate prediction of the polycrystalline elastic-viscoplastic behavior. For the different sets of crystalline viscoplastic parameters, this model led to closer predictions of monotonic (traction, relaxation and creep) and cyclic deformation behaviors in comparison to FE calculations than the other self-consistent models.

Nevertheless, the comparison under ratcheting loading conditions (non-symmetrical cyclic stress-controlled loading) proved to be more delicate. In the one hand, the viscoplastic strain evolution curves calculated using the Kröner model were closer to the ones computed by the FE method in the case of mean stresses lower than 125 MPa. On the other hand, the Kröner-Secant model presented better predictions of the viscoplastic strain evolution for mean stresses higher than this stress value. A large ratcheting sensitivity is observed, according the applied scale transition rule.

For comparisons to the experimental results of ratcheting tests, normally carried out under low mean stresses, the Kröner self-consistent model was preferred, while the Kröner-Secant model was strongly recommended to evaluate the polycrystalline viscoplastic behavior, and in particular in the case of 316L(N) SS.

In a second step, we proposed a model based on the description of different physical mechanisms of the crystalline viscoplastic deformation of CFC metals at relative low temperatures. The evolution laws of screw and edge dislocations densities were considered. The multiplication and annihilation of these mobile dislocations were considered. The evolution of edge-dipoles density was also introduced. The mechanisms of production and annihilation of edge-dipoles were considered. Data from experimental measurements and discrete dislocation dynamics were used as input parameters, resulting in a reduced number of adjustable parameters. The only two parameters to be identified are the activation volume and the activation energy. They were adjusted using polycrystalline tensile curves at different strain rates and temperatures. These viscosity-related parameters are dependent on the chemical composition and could in a long-term be estimated by atomistic calculations.

This model was validated by comparison with experimental results obtained for different of 316L and 316L(N) SS procurements. We have shown that the model provides an accurate description of the polycrystals monotonic (tension, relaxation) and cyclic behavior, over a wide range of cyclic strain amplitudes, between $\pm 0.1\%$ and $\pm 0.8\%$, at room temperature. The evolution of the dislocation density was in agreement with the experimental measurements too. The use of the Kröner approach allowed a correct description of ratcheting evolution at room temperature for numerous loading conditions, at different mean stresses, stress amplitudes and stress rates.

A specificity of this model was the partition of the standard triangle of the grains into two families: one accounting the grains oriented for single slip and another one for the grains in multiple slip. The criterion applied for the partition was determined from observations of the microstructure of dislocations. Given the sensitivity of the model with respect to this procedure, it seemed appropriate to introduce some improvements to the model. In order to obtain a better description of the dislocation density evolution, the contribution of each type of interaction on the dislocations production was taking into account by an additive model. This modification allowed eliminating the partition of the standard triangle, without impacting the prediction of the polycrystal behavior.

However, it was shown that this model is not able to describe either the low number of activated slip systems, observed in metals and alloys with low stack fault energy, or the effect of stack fault energy on the Hall-Petch behavior.

A scale transition model based on the localization of the plastic strain in thin slip bands observed during monotonic loading at room temperature was therefore proposed. For this model, the Eshelby inclusion is applied to the configuration of an isolated "penny-shape" ellipsoid. The bands are considered sufficiently long and close one to the other, so that the stress field is supposed homogeneous in each grain. Unlike the previous scale transition models (Kroner, Kroner-Secant, Mercier-Molinari), this simplified localization rule allows the activation of a low number of slip systems in FCC metals, resulting in tensile curves in good agreement with the experimental observations. Compared with other scale transition models, the « slip band » model provides a better prediction of the grain size effect (Hall-Petch effect) of FCC metals, covering a wide range stacking of fault energy.

Finally, the mechanisms observed at high temperature during the viscoplastic deformation of 316L(N) SS were introduced. Between 723 and 923K, dynamic strain aging (DSA), dislocation climb and cross-slip activation play an important role on the mechanical behavior of the material. At high temperatures, the proposed model takes into account these phenomena, as well as the development of a well-defined dislocation microstructure. The description of these mechanisms led to introduce an additional adjustable parameter, related to the stress induced by the DSA. Similar to the room temperature adjustment

process, the DSA and the two viscoplastic parameters were adjusted by inverse identification using tensile tests carried out at different temperatures and strain rates. The model allows predicting the inverse strain rate sensitivity observed for 316L(N) SS at temperatures between 723 and 923K.

The strong cyclic hardening observed for the 316L(N) SS at high temperatures was rather fair described by the model, as well as the stress-strain loops. By considering the mechanism of the dislocations climb, the model correctly describes the short-term stress relaxation after tensile loading. However, an overestimation of long-term stress relaxation was observed. In the case of fatigue-relaxation, the model did not account for the additional hardening experimentally observed for short holding times. Moreover, the proposed model satisfactorily accounts for the stress symmetrization and ratcheting under a biaxial tensile-torsion loading at elevated temperature. For this last point, the use of the Kröner rule was preferred.

For future studies, some improvements are proposed. In particular, a model based on the locally heterogeneous distribution of forest dislocations obstacles, resulting in a progressive dislocation pinning, previously implemented at the CEA for the case of martensitic stainless steels (grade 91), is considered for 316L(N) SS. Moreover, a dual-phase model, accounting the dislocation transition from the hard phase to the soft one, is under being developed, in order to improve the fatigue-relaxation predictions.

At room temperature, the predictions of the scale transition rule based on the localization of plastic strain in slip bands should be compared with respect to the full-field FE calculations. The self-consistent model predictions should also be confronted with experimental results under cyclic loadings.

Finally, the proposed model must be simplified, allowing calculations of structures, complementing the current phenomenological models computations applied at CEA. The ultimate objective of this simplified model would be to simulate the behavior of the SFR structures under load conditions similar to those observed during their operation.

Références

1. CEA. 2017 ASTRID, une option pour la quatrième génération. *CEA - ASTRID Une Option Pour Quatr. Génér.* See <http://www.cea.fr/Pages%2fdomaines-recherche%2fenergies%2fenergie-nucleaire%2fastrid-option-quatrieme-generation.aspx> (accessed on 26 February 2018).
2. Chellapandi P, Srinivasan R, Chetal SC, Raj B. 2006 Experimental creep life assessment of tubular structures with geometrical imperfections in welds with reference to fast reactor plant life. *Int. J. Press. Vessels Pip.* **83**, 556–564. (doi:10.1016/j.ijpvp.2006.03.009)
3. Gentet D. 2010 Compréhension et modélisation du comportement mécanique cyclique anisotherme de l'acier austénitique AISI 316L(N). Université de la Rochelle, CEA Cadarache.
4. Lemaitre J, Chaboche J-L. 1990 *Mechanics of Solid Materials*. Cambridge: Cambridge University Press.
5. Chaboche JL. 2008 A review of some plasticity and viscoplasticity constitutive theories. *Int. J. Plast.* **24**, 1642–1693. (doi:10.1016/j.ijplas.2008.03.009)
6. Krajcinovic D. 1987 Micromechanical Basis of Phenomenological Models. In *Continuum Damage Mechanics Theory and Application*, pp. 195–206. Springer, Vienna. (doi:10.1007/978-3-7091-2806-0_5)
7. Lemarchand C, Chaboche JL, Devincere B, Kubin LP. 1999 Multiscale modelling of plastic deformation. *J. Phys. Iv* **9**, 271–277. (doi:10.1051/jp4:1999927)
8. Cailletaud G, Nouailhas D, Grattier J, Levaillant C, Mottot M, Tortel J, Escavaraige C, Héliot J, Kang S. 1984 A review of creep-fatigue life prediction methods: identification and extrapolation to long term and low strain cyclic loading. *Nucl. Eng. Des.* **83**, 267–278. (doi:10.1016/0029-5493(84)90121-3)
9. McDowell DL, Dunne FPE. 2010 Microstructure-sensitive computational modeling of fatigue crack formation. *Int. J. Fatigue* **32**, 1521–1542. (doi:10.1016/j.ijfatigue.2010.01.003)
10. Kubin L, Devincere B, Hoc T. 2008 Modeling dislocation storage rates and mean free paths in face-centered cubic crystals. *Acta Mater.* **56**, 6040–6049. (doi:10.1016/j.actamat.2008.08.012)
11. Christopher J, Choudhary BK. 2014 Kinetics of Uniaxial Tensile Flow and Work Hardening Behavior of Type 316L(N) Austenitic Stainless Steel in the Framework of Two-Internal-Variable Approach. *Metall. Mater. Trans. A* **46**, 674–687. (doi:10.1007/s11661-014-2660-z)
12. Costa e Silva A, Mei P. 2006 *Aços e ligas especiais*. 2nd edn. Edgard Blücher.
13. Ganesan V, Mathew MD, Rao KBS. 2009 Influence of nitrogen on tensile properties of 316LN SS. *Mater. Sci. Technol.* **25**, 614–618. (doi:10.1179/174328408X317066)
14. Karaman I, Sehitoglu H, Maier HJ, Chumlyakov YI. 2001 Competing mechanisms and modeling of deformation in austenitic stainless steel single crystals with and without nitrogen. *Acta Mater.* **49**, 3919–3933. (doi:10.1016/S1359-6454(01)00296-8)

15. Sarkar A, Nagesha A, Sandhya R, Mathew MD. 2013 Effect of Temperature on Ratcheting Behaviour of 316LN SS. *Procedia Eng.* **55**, 650–654. (doi:10.1016/j.proeng.2013.03.309)
16. Vogt J-B. 2001 Fatigue properties of high nitrogen steels. *J. Mater. Process. Technol.* **117**, 364–369. (doi:10.1016/S0924-0136(01)00799-3)
17. AFCEN. 2012 *RCC-MRx-2012*.
18. Gaudin C. 2002 Etude des mécanismes associés au rochet cyclique d'un acier austénitique AISI 316L. Université de Technologie Compiègne.
19. Sauzay M. 2006 Effet de l'anisotropie élastique cristalline sur la distribution des facteurs de Schmid à la surface des polycristaux. *Comptes Rendus Mécanique* **334**, 353–361. (doi:10.1016/j.crme.2006.03.004)
20. Cheng AS, Laird C. 1981 Mechanisms of fatigue hardening in copper single crystals: The effects of strain amplitude and orientation. *Mater. Sci. Eng.* **51**, 111–121. (doi:10.1016/0025-5416(81)90112-9)
21. Buque C. 2001 Dislocation structures and cyclic behaviour of [011] and [111]-oriented nickel single crystals. *Int. J. Fatigue* **23**, 671–678. (doi:10.1016/S0142-1123(01)00032-9)
22. Schramm RE, Reed RP. 1975 Stacking fault energies of seven commercial austenitic stainless steels. *Metall. Trans. A* **6**, 1345. (doi:10.1007/BF02641927)
23. Rhodes CG, Thompson AW. 1977 The composition dependence of stacking fault energy in austenitic stainless steels. *Metall. Trans. A* **8**, 1901–1906. (doi:10.1007/BF02646563)
24. Pickering FB. 1984 *Proc. Of the Conf. Stainless Steel*.
25. Dai QX, Wang AD, Cheng X, Luo XM. 2002 Stacking fault energy of cryogenic austenitic steels. *Chin. Phys.*
26. Bonneville J, Escaig B, Martin JL. 1988 A study of cross-slip activation parameters in pure copper. *Acta Metall.* **36**, 1989–2002. (doi:10.1016/0001-6160(88)90301-X)
27. Jackson PJ. 1983 The role of cross-slip in the plastic deformation of crystals. *Mater. Sci. Eng.* **57**, 39–47. (doi:10.1016/0025-5416(83)90025-3)
28. Li P, Li SX, Wang ZG, Zhang ZF. 2011 Fundamental factors on formation mechanism of dislocation arrangements in cyclically deformed fcc single crystals. *Prog. Mater. Sci.* **56**, 328–377. (doi:10.1016/j.pmatsci.2010.12.001)
29. Sakaki S, Yoshida M, Horibe S. 2014 Effect of stacking fault energy on pulsating fatigue behavior for fcc metals under the fully repeated loading. *Mater. Sci. Eng. A* **607**, 1–5. (doi:10.1016/j.msea.2014.03.142)
30. Dieter GE. 1988 *Mechanical Metallurgy Si Metric Edition - ed. Adapted by David Bacon*. 3rd edition. McGraw-Hill Book Company.
31. François D, Pineau A, Zaoui A. 1992 *Comportement mécanique des matériaux : Élasticité et plasticité*. 2nd edn. Paris: Hermes.
32. Magnin T, Driver J, Lepinoux J, Kubin LP. 1984 Aspects microstructuraux de la déformation cyclique dans les métaux et alliages C. C. et C.F.C. I. - Consolidation cyclique. *Rev. Phys. Appl.* , 467–482.

33. Sommer C, Mughrabi H, Lochner D. 1998 Influence of temperature and carbon content on the cyclic deformation and fatigue behaviour of α -iron. Part I. Cyclic deformation and stress-behaviour. *Acta Mater.* **46**, 1527–1536. (doi:10.1016/S1359-6454(97)00362-5)
34. Caillard D, Martin J. 2003 *Thermally activated mechanisms in crystal plasticity*. Pergamon Materials Series.
35. Catalao S, Feaugas X, Cabrillat MT. 2005 Dipole heights in cyclically deformed polycrystalline AISI 316L stainless steel. *Mater. Sci. Eng. A* **400–401**, 349–352.
36. Prinz F, Argon AS, Moffatt WC. 1982 Recovery of dislocation structures in plastically deformed copper and nickel single crystals. *Acta Metall.* **30**, 821–830. (doi:10.1016/0001-6160(82)90080-3)
37. Cai T, Zhang ZJ, Zhang P, Yang JB, Zhang ZF. 2014 Competition between slip and twinning in face-centered cubic metals. *J. Appl. Phys.* **116**, 163512. (doi:10.1063/1.4898319)
38. Blandin A, Friedel J, Saada G. 1966 Les énergies de fautes d'empilement et de macles dans les métaux normaux. *J. Phys. Colloq.* **27**, 128–136.
39. Rémy L. 1981 The interaction between slip and twinning systems and the influence of twinning on the mechanical behavior of fcc metals and alloys. *Metall. Trans. A* **12**, 387–408. (doi:10.1007/BF02648536)
40. Ackermann F, Kubin LP, Lepinoux J, Mughrabi H. 1984 The dependence of dislocation microstructure on plastic strain amplitude in cyclically strained copper single crystals. *Acta Metall.* **32**, 715–725. (doi:10.1016/0001-6160(84)90145-7)
41. Gerland M, Mendez J, Violan P, Ait Saadi B. 1989 Evolution of dislocation structures and cyclic behaviour of a 316L-type austenitic stainless steel cycled in vacuo at room temperature. *Mater. Sci. Eng. A* **118**, 83–95. (doi:10.1016/0921-5093(89)90060-9)
42. Laird C, Charsley P, Mughrabi H. 1986 Low energy dislocation structures produced by cyclic deformation. *Mater. Sci. Eng.* **81**, 433–450. (doi:10.1016/0025-5416(86)90281-8)
43. Mughrabi H. 1978 The cyclic hardening and saturation behaviour of copper single crystals. *Mater. Sci. Eng.* **33**, 207–223. (doi:10.1016/0025-5416(78)90174-X)
44. Okamoto K, Yoshinari A, Kaneda J, Aono Y, Kato T. 2000 Production and property evaluation of single crystal austenitic stainless steels. *Mater. Trans. JIM* **41**, 806–814.
45. Sauzay M, Kubin LP. 2011 Scaling laws for dislocation microstructures in monotonic and cyclic deformation of fcc metals. *Prog. Mater. Sci.* **56**, 725–784. (doi:10.1016/j.pmatsci.2011.01.006)
46. Franciosi P, Berveiller M, Zaoui A. 1980 Latent hardening in copper and aluminium single crystals. *Acta Metall.* **28**, 273–283. (doi:10.1016/0001-6160(80)90162-5)
47. Franciosi P. 1985 The concepts of latent hardening and strain hardening in metallic single crystals. *Acta Metall.* **33**, 1601–1612. (doi:10.1016/0001-6160(85)90154-3)
48. Franciosi P. 1978 Plasticité à froid des monocristaux CFC - Etude du durcissement latent. PhD Dissertation, Université Paris XIII.

49. Basinski SJ, Basinski ZS. 1979 *Plastic deformation and work hardening*. Basinski, S.J.; Basinski, Z.S.; Div. of Phys., Nat. Res. Council of Canada, Ottawa, Ont., Canada.: North-Holland.
50. Schmid E, Boas W. 1935 *Plasticity of Crystals*. Springer. See [//www.springer.com/la/book/9781504119276](http://www.springer.com/la/book/9781504119276).
51. Bassani JL, Wu T-Y. 1991 Latent Hardening in Single Crystals II. Analytical Characterization and Predictions. *Proc. R. Soc. Lond. Math. Phys. Eng. Sci.* **435**, 21–41. (doi:10.1098/rspa.1991.0128)
52. Wu T-Y, Bassani JL, Laird C. 1991 Latent Hardening in Single Crystals I. Theory and Experiments. *Proc. R. Soc. Lond. Math. Phys. Eng. Sci.* **435**, 1–19. (doi:10.1098/rspa.1991.0127)
53. Cottrell A, Bilby B. 1949 Dislocation Theory of Yielding and Strain Ageing of Iron. *Proc. Phys. Soc. Lond. Sect. A* **62**, 49–62. (doi:10.1088/0370-1298/62/1/308)
54. Suzuki H. 1962 Segregation of Solute Atoms to Stacking Faults. *J. Phys. Soc. Jpn.* **17**, 322–. (doi:10.1143/JPSJ.17.322)
55. Isaac Samuel E, Choudhary BK, Bhanu Sankara Rao K. 2002 Influence of temperature and strain rate on tensile work hardening behaviour of type 316 LN austenitic stainless steel. *Scr. Mater.* **46**, 507–512. (doi:10.1016/S1359-6462(02)00023-4)
56. Srinivasan VS, Valsan M, Sandhya R, Bhanu Sankara Rao K, Mannan SL, Sastry DH. 1999 High temperature time-dependent low cycle fatigue behaviour of a type 316L(N) stainless steel. *Int. J. Fatigue* **21**, 11–21. (doi:10.1016/S0142-1123(98)00052-8)
57. Blanc D. 1986 Dynamic strain ageing and relaxation in 316 type stainless steel. Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, Paris.
58. Ivanchenko M. 2010 Dynamic strain aging of austenitic stainless steels and Ni-based alloys. Aalto University, Espoo, Finland.
59. Rodriguez P. 1984 Serrated plastic flow. *Bull. Mater. Sci.* , 653–663.
60. Strudel JL. 1979 *Dislocations et déformation plastique*. Les éditions de Physique.
61. Choudhary BK. 2013 Influence of Strain Rate and Temperature on Tensile Deformation and Fracture Behavior of Type 316L(N) Austenitic Stainless Steel. *Metall. Mater. Trans. A* **45**, 302–316. (doi:10.1007/s11661-013-1978-2)
62. Choudhary BK. 2014 Activation energy for serrated flow in type 316L(N) austenitic stainless steel. *Mater. Sci. Eng. A* **603**, 160–168. (doi:10.1016/j.msea.2014.02.083)
63. Pham MS, Holdsworth SR. 2012 Dynamic strain ageing of AISI 316L during cyclic loading at 300 °C: Mechanism, evolution, and its effects. *Mater. Sci. Eng. A* **556**, 122–133. (doi:10.1016/j.msea.2012.06.067)
64. Gerland M, Alain R, Ait Saadi B, Mendez J. 1997 Low cycle fatigue behaviour in vacuum of a 316L-type austenitic stainless steel between 20 and 600°C—Part II: Dislocation structure evolution and correlation with cyclic behaviour. *Mater. Sci. Eng. A* **229**, 68–86. (doi:10.1016/S0921-5093(96)10560-8)

65. Stewart GR, Jonas JJ. 2004 Static and Dynamic Strain Aging at High Temperatures in 304 Stainless Steel. *ISIJ Int.* **44**, 1263–1272. (doi:10.2355/isijinternational.44.1263)
66. Blanc D, Strudel JL. 1985 Dynamic Strain Ageing and Relaxation in 316 Type Stainless Steel. In *Strength of Metals and Alloys (ICSMA 7)*, pp. 349–354. Pergamon. (doi:10.1016/B978-0-08-031642-0.50065-9)
67. Tsuzaki K, Hori T, Maki T, Tamura I. 1983 Dynamic strain aging during fatigue deformation in type 304 austenitic stainless steel. *Mater. Sci. Eng.* **61**, 247–260. (doi:10.1016/0025-5416(83)90107-6)
68. Almeida LH de, Emygdio PRO (coppe/Ufrj, Le May I (Metallurgical CSL. 1994 Activation energy calculation and dynamic strain aging in austenitic stainless steel. *Scr. Metall. Mater. U. S.* **31:5**. (doi:10.1016/0956-716X(94)90134-1)
69. Cho S-H, Yoo Y-C, Jonas JJ. 2000 Static and dynamic strain aging in 304 austenitic stainless steel at elevated temperatures. *J. Mater. Sci. Lett.* **19**, 2019–2022. (doi:10.1023/A:1026767120165)
70. Choudhary BK, Christopher J. 2015 Tensile flow and work hardening behaviour of type 316L(N) austenitic stainless steel in the framework of one-internal-variable and two-internal-variable approaches. *Mater. Sci. Eng. A* **636**, 269–278. (doi:10.1016/j.msea.2015.03.107)
71. Bouchou A. 1993 Modélisation du comportement de l'acier inoxydable 17-12 MoSPH sous sollicitations anisothermes entre 20 C et 600 C, Mise en évidence d'un effet d'histoire en température. Thèse de Doctorat, Université de Franche-Comté.
72. Delobelle P. 1993 Synthesis of the elastoviscoplastic behavior and modelization of an austenitic stainless steel over a large temperature range, under uniaxial and biaxial loadings, part II: Phenomenological modelization. *Int. J. Plast.* **9**, 87–118. (doi:10.1016/0749-6419(93)90015-1)
73. Prasad Reddy GV, Sandhya R, Sankaran S, Parameswaran P, Laha K. 2015 Creep–fatigue interaction behavior of 316LN austenitic stainless steel with varying nitrogen content. *Mater. Des.* **88**, 972–982. (doi:10.1016/j.matdes.2015.09.007)
74. Zhou H, He Y, Cui M, Cen Y, Jiang J. 2013 Dependence of dynamic strain ageing on strain amplitudes during the low-cycle fatigue of TP347H austenitic stainless steel at 550 °C. *Int. J. Fatigue* **56**, 1–7. (doi:10.1016/j.ijfatigue.2013.07.010)
75. Huntington HB. 1958 The elastic constant of crystals, in: S. Frederick & T. David (Eds). *Solid State Phys.* **7**, 214.
76. Ledbetter HM. 1981 Predicted single-crystal elastic constants of stainless-steel 316. *Br. J. Non-Destr. Test.* **23**, 286–7.
77. Alain R, Violan P, Mendez J. 1997 Low cycle fatigue behavior in vacuum of a 316L type austenitic stainless steel between 20 and 600°C Part I: Fatigue resistance and cyclic behavior. *Mater. Sci. Eng. A* **229**, 87–94. (doi:10.1016/S0921-5093(96)10558-X)
78. Barnby JT. 1965 Effect of strain aging on the high-temperature tensile properties of an AISI 316 austenitic stainless steel. *J. Iron Steel Inst.* , 392–397.
79. Kocks UF, Mecking H. 2003 Physics and phenomenology of strain hardening: the FCC case. *Prog. Mater. Sci.* **48**, 171–273. (doi:10.1016/S0079-6425(02)00003-8)

80. Kocks UF. 1970 The relation between polycrystal deformation and single-crystal deformation. *Metall. Mater. Trans.* **1**, 1121–1143. (doi:10.1007/BF02900224)
81. Devincere B, Hoc T, Kubin L. 2008 Dislocation Mean Free Paths and Strain Hardening of Crystals. *Science* **320**, 1745–1748. (doi:10.1126/science.1156101)
82. Kubin L, Devincere B, Hoc T. 2008 Toward a physical model for strain hardening in fcc crystals. *Mater. Sci. Eng. A* **483–484**, 19–24. (doi:10.1016/j.msea.2007.01.167)
83. Kubin L, Hoc T, Devincere B. 2009 Dynamic recovery and its orientation dependence in face-centered cubic crystals. *Acta Mater.* **57**, 2567–2575. (doi:10.1016/j.actamat.2009.02.013)
84. Ashby MF. 1970 The deformation of plastically non-homogeneous materials. *Philos. Mag.* **21**, 399–424. (doi:10.1080/14786437008238426)
85. Guilhem Y. 2011 Étude numérique des champs mécaniques locaux dans les agrégats polycristallins d’acier 316L sous chargement de fatigue. École Nationale Supérieure des Mines de Paris.
86. Hazan J. 2017 Communication privée.
87. Ménard M. 2005 Effets de l’hydrogène absorbé sur la localisation de la déformation plastique d’un acier inoxydable 316L. PhD Dissertation, Université Bordeaux I, Bordeaux.
88. Feaugas X. 1999 Contribution à la compréhension des mécanismes de déformation plastique et d’endommagement des matériaux : un point de vue expérimental. Mémoire d’habilitation à diriger des recherches.
89. Kang G, Dong Y, Wang H, Liu Y, Cheng X. 2010 Dislocation evolution in 316L stainless steel subjected to uniaxial ratchetting deformation. *Mater. Sci. Eng. A* **527**, 5952–5961. (doi:10.1016/j.msea.2010.06.020)
90. Facheris G, Pham M-S, Janssens KGF, Holdsworth SR. 2013 Microscopic analysis of the influence of ratcheting on the evolution of dislocation structures observed in AISI 316L stainless steel during low cycle fatigue. *Mater. Sci. Eng. A* **587**, 1–11. (doi:10.1016/j.msea.2013.08.041)
91. Berling JT, Slot T. 1969 Effect of Temperature and Strain Rate on Low-Cycle Fatigue Resistance of AISI 304, 316, and 348 Stainless Steels. *Fatigue High Temp.* (doi:10.1520/STP33646S)
92. Kashyap B, Mctaggart K, Tangri K. 1988 Study on the Substructure Evolution and Flow Behavior in Type-316L Stainless-Steel Over the Temperature-Range 21-900-Degrees-C. *Philos. Mag. -Phys. Condens. Matter Struct. Defects Mech. Prop.* **57**, 97–114.
93. Portier L. 1999 Contribution à l’étude de la déformation progressive des structures : étude expérimentale et étude comparative de lois de comportement. Thèse de Doctorat, École Normale Supérieure de Cachan.
94. Wray PJ. 1969 Strain-Rate Dependence of the Tensile Failure of a Polycrystalline Material at Elevated Temperatures. *J. Appl. Phys.* **40**, 4018–4029. (doi:10.1063/1.1657137)
95. Kang G. 2008 Ratchetting: Recent progresses in phenomenon observation, constitutive modeling and application. *Int. J. Fatigue* **30**, 1448–1472. (doi:10.1016/j.ijfatigue.2007.10.002)

96. Taleb L. 2013 About the cyclic accumulation of the inelastic strain observed in metals subjected to cyclic stress control. *Int. J. Plast.* **43**, 1–19. (doi:10.1016/j.ijplas.2012.10.009)
97. Yu D, Chen G, Yu W, Li D, Chen X. 2012 Visco-plastic constitutive modeling on Ohno–Wang kinematic hardening rule for uniaxial ratcheting behavior of Z2CND18.12N steel. *Int. J. Plast.* **28**, 88–101. (doi:10.1016/j.ijplas.2011.06.001)
98. Ganesan V, Laha K, Nandagopal M, Parameswaran P, Mathew MD. 2014 Effect of nitrogen content on dynamic strain ageing behaviour of type 316LN austenitic stainless steel during tensile deformation. *Mater. High Temp.* **31**, 162–170. (doi:10.1179/1878641314Y.0000000009)
99. Michel DJ, Moteff J, Lovell AJ. 1973 Substructure of type 316 stainless steel deformed in slow tension at temperatures between 21° and 816°C. *Acta Metall.* **21**, 1269–1277.
100. Pei H, Li S, Wang L, Zhang H, Zhao Z, Wang X. 2014 Influence of Initial Microstructures on Deformation Behavior of 316LN Austenitic Steels at 400-900 °C. *J. Mater. Eng. Perform.* **24**, 694–699. (doi:10.1007/s11665-014-1353-5)
101. Wang W, Yan W, Yang K, Shan Y, Jiang Z. 2010 Temperature Dependence of Tensile Behaviors of Nitrogen-Alloyed Austenitic Stainless Steels. *J. Mater. Eng. Perform.* **19**, 1214–1219. (doi:10.1007/s11665-010-9603-7)
102. Bouchou A, Delobelle P. 1996 Behavior and modeling of a 17-12 SPH stainless steel under cyclic, uni and bidirectional, anisothermal loadings. Part I: Behavior. *Int. J. Plast.* **12**, 295–309. (doi:10.1016/S0749-6419(96)00009-5)
103. Gorlier C. 1984 Mécanismes de fatigue plastique de l'acier 316L sous formes monocristalline et polycristalline. Ecole Nationale Supérieure des Mines de Saint-Etienne.
104. Li P, Li SX, Wang ZG, Zhang ZF. 2010 Dislocation arrangements in cyclically deformed Au single crystal. *Mater. Sci. Eng. A* **527**, 6244–6247. (doi:10.1016/j.msea.2010.06.040)
105. Wang Z, Margolin H. 1986 The baushinger effect, surface and interior stresses in cyclically strained 70-30 alpha brass single crystals. *Acta Metall.* **34**, 721–733. (doi:10.1016/0001-6160(86)90187-2)
106. Daniel RC, Horne GT. 1971 The Bauschinger effect and cyclic hardening in copper. *Metall. Trans.* **2**, 1161–1172. (doi:10.1007/BF02664248)
107. Li Y, Laird C. 1994 Cyclic response and dislocation structures of AISI 316L stainless steel. Part 1: single crystals fatigued at intermediate strain amplitude. *Mater. Sci. Eng. A* **186**, 65–86. (doi:10.1016/0921-5093(94)90306-9)
108. Mughrabi H. 1983 Dislocation wall and cell structures and long-range internal stresses in deformed metal crystals. *Acta Metall.* **31**, 1367–1379. (doi:10.1016/0001-6160(83)90007-X)
109. Cailletaud G. 1987 Une approche micromécanique phénoménologique du comportement inélastique des métaux. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI.
110. Pedersen OB. 1990 Mechanism maps for cyclic plasticity and fatigue of single phase materials. *Acta Metall. Mater.* **38**, 1221–1239. (doi:10.1016/0956-7151(90)90194-L)
111. Cottrell AH. 1953 Dislocations and plastic flow in crystals. p. 111. London: Oxyford University Press.

112. Fujita H, Kimura S. 1983 Role of Conjugate Slip in Deformation of Cu-10at%Al Single Crystals. *J. Phys. Soc. Jpn.* **52**, 157–167. (doi:10.1143/JPSJ.52.157)
113. Inui H, Hong SI, Laird C. 1990 A TEM study of dislocation structures in fatigued Cu-16 at.% Al single crystals. *Acta Metall. Mater.* **38**, 2261–2274. (doi:10.1016/0956-7151(90)90093-V)
114. Lukas P, Klesnil M. 1967 Fatigue Hardening of Cu-Zn Alloys. *Phys. Status Solidi* **21**, 717-. (doi:10.1002/pssb.19670210233)
115. Lukas P, Klesnil M. 1970 Dislocation Structures in Fatigued Cu-Zn Single Crystals. *Phys. Status Solidi* **37**, 833-. (doi:10.1002/pssb.19700370234)
116. Mott NF. 1952 A theory of work-hardening of metal crystals. *Lond. Edinb. Dublin Philos. Mag. J. Sci.* **43**, 1151–1178. (doi:10.1080/14786441108521024)
117. Seeger A, Diehl J, Mader S, Rebstock H. 1957 Work-hardening and work-softening of face-centred cubic metal crystals. *Philos. Mag. J. Theor. Exp. Appl. Phys.* **2**, 323–350. (doi:10.1080/14786435708243823)
118. Kassner ME, Geantil P, Levine LE. 2013 Long range internal stresses in single-phase crystalline materials. *Int. J. Plast.* **45**, 44–60. (doi:10.1016/j.ijplas.2012.10.003)
119. Gaucherin G, Hofmann F, Belnoue JP, Korsunsky AM. 2009 Crystal plasticity and hardening: A dislocation dynamics study. *Procedia Eng.* **1**, 241–244. (doi:10.1016/j.proeng.2009.06.057)
120. Zhu D, Zhang H, Li DY. 2011 Molecular dynamics simulation of Bauschinger's effect in deformed copper single crystal in different strain ranges. *J. Appl. Phys.* **110**, 124911. (doi:10.1063/1.3672414)
121. Giordana MF, Giroux P-F, Alvarez-Armas I, Sauzay M, Armas A, Kruml T. 2012 Microstructure evolution during cyclic tests on EUROFER 97 at room temperature. TEM observation and modelling. *Mater. Sci. Eng. A* **550**, 103–111. (doi:10.1016/j.msea.2012.04.038)
122. Hull D, Bacon DJ. 2011 *Introduction to dislocations*. 5th edn. Elsevier.
123. Papanikolaou S, Cui Y, Ghoniem N. 2018 Avalanches and Plastic Flow in Crystal Plasticity: An Overview. *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* **26**, 013001. (doi:10.1088/1361-651X/aa97ad)
124. Déprés C. 2004 Modélisation physique des stades précurseurs de l'endommagement en fatigue dans l'acier inoxydable austénitique 316L. PhD Dissertation, Institut National Polytechnique de Grenoble.
125. Depres C, Reddy GVP, Robertson C, Fivel M. 2014 An extensive 3D dislocation dynamics investigation of stage-I fatigue crack propagation. *Philos. Mag.* **94**, 4115–4137. (doi:10.1080/14786435.2014.978830)
126. Lorenzo F, Laird C. 1984 Cyclic creep acceleration and retardation in polycrystalline copper tested at ambient temperature. *Acta Metall.* **32**, 681–692.
127. Cottrell AH. 1953 Theory of dislocations. *Prog. Met. Phys.* **4**, 205–264. (doi:10.1016/0502-8205(53)90018-5)

128. Yaguchi H, Margolin H. 1986 Grain boundary contribution to the bauschinger effect in beta-brass bicrystals. *Metall. Trans. A* **17**, 2017–2029. (doi:10.1007/BF02644999)
129. Mughrabi H, Wang R. 1988 Cyclic stress-strain response and high-cycle fatigue behaviour of copper polycrystals. *Basic Mech. Fatigue Met. Proc. Int. Colloq.* , 1–13.
130. Obrtlík K, Kruml T, Polák J. 1994 Dislocation structures in 316L stainless steel cycled with plastic strain amplitudes over a wide interval. *Mater. Sci. Eng. A* **187**, 1–9. (doi:10.1016/0921-5093(94)90325-5)
131. Pham MS, Solenthaler C, Janssens KGF, Holdsworth SR. 2011 Dislocation structure evolution and its effects on cyclic deformation response of AISI 316L stainless steel. *Mater. Sci. Eng. A* **528**, 3261–3269. (doi:10.1016/j.msea.2011.01.015)
132. Polák J, Obrtlík K, Hájek M. 1994 Cyclic Plasticity in Type 316L Austenitic Stainless Steel. *Fatigue Fract. Eng. Mater. Struct.* **17**, 773–782. (doi:10.1111/j.1460-2695.1994.tb00808.x)
133. Li Y, Laird C. 1994 Cyclic response and dislocation structures of AISI 316L stainless steel. Part 2: polycrystals fatigued at intermediate strain amplitude. *Mater. Sci. Eng. A* **186**, 87–103. (doi:10.1016/0921-5093(94)90307-7)
134. Pham MS, Holdsworth SR, Janssens KGF, Mazza E. 2013 Cyclic deformation response of AISI 316L at room temperature: Mechanical behaviour, microstructural evolution, physically-based evolutionary constitutive modelling. *Int. J. Plast.* **47**, 143–164. (doi:10.1016/j.ijplas.2013.01.017)
135. Yu D, Yu W, Chen G, Jin F, Chen X. 2012 Role of dynamic strain aging in the tensile property, cyclic deformation and fatigue behavior of Z2CND18.12N stainless steel between 293 K and 723 K. *Mater. Sci. Eng. A* **558**, 730–736. (doi:10.1016/j.msea.2012.08.088)
136. Prasanna HU, Udupa KR. 2013 Dynamic Strain Ageing in AISI 316L Type Stainless Steel as Revealed by Indentation Creep Studies. *Procedia Eng.* **55**, 566–572. (doi:10.1016/j.proeng.2013.03.296)
137. Sauzay M, Mottot M, Allais L, Noblecourt M, Monnet I, Périnet J. 2004 Creep-fatigue behaviour of an AISI stainless steel at 550 °C. *Nucl. Eng. Des.* **232**, 219–236. (doi:10.1016/j.nucengdes.2004.05.005)
138. Li P, Li SX, Wang ZG, Zhang ZF. 2010 Formation mechanisms of cyclic saturation dislocation patterns in [0 0 1], [0 1 1] and copper single crystals. *Acta Mater.* **58**, 3281–3294. (doi:10.1016/j.actamat.2010.02.002)
139. Man J, Obrtlík K, Blochwitz C, Polák J. 2002 Atomic force microscopy of surface relief in individual grains of fatigued 316L austenitic stainless steel. *Acta Mater.* **50**, 3767–3780. (doi:10.1016/S1359-6454(02)00167-2)
140. Gerland M, Mendez J, Lépinoux J, Violan P. 1993 Dislocation structure and corduroy contrast in a 316L alloy fatigued at (0.3–0.5) Tm. *Mater. Sci. Eng. A* **164**, 226–229. (doi:10.1016/0921-5093(93)90667-4)
141. Gerland M, Violan P. 1986 Secondary cyclic hardening and dislocation structures in type 316 stainless steel at 600°C. *Mater. Sci. Eng.* **84**, 23–33. (doi:10.1016/0025-5416(86)90219-3)

142. L'esperance G, Vogt JB, Dickson JI. 1986 The identification of labyrinth wall orientations in cyclically deformed AISI-SAE 316 stainless steel. *Mater. Sci. Eng.* **79**, 141–147. (doi:10.1016/0025-5416(86)90397-6)
143. Catalao S. 2005 Étude de l'interaction plasticité-fluage d'un acier austénitique par une approche micro-mécanique (non publiée). Thèse de Doctorat (non publiée), École Centrale de Paris, Laboratoire de Mécanique des Sols, Structures et de Matériaux (LMSS-Mat).
144. Nagesha A, Kannan R, Parameswaran P, Sandhya R, Rao KBS, Singh V. 2010 A comparative study of isothermal and thermomechanical fatigue on type 316L(N) austenitic stainless steel. *Mater. Sci. Eng. A* **527**, 5969–5975. (doi:10.1016/j.msea.2010.05.082)
145. Prasad Reddy GV, Kannan R, Mariappan K, Sandhya R, Sankaran S, Bhanu Sankara Rao K. 2015 Effect of strain rate on low cycle fatigue of 316LN stainless steel with varying nitrogen content: Part-I cyclic deformation behavior. *Int. J. Fatigue* **81**, 299–308. (doi:10.1016/j.ijfatigue.2015.07.033)
146. Feaugas X, Gaudin C. 2004 Ratchetting process in the stainless steel AISI 316L at 300 K: an experimental investigation. *Int. J. Plast.* **20**, 643–662. (doi:10.1016/S0749-6419(03)00076-7)
147. Gaudin C, Feaugas X. 2004 Cyclic creep process in AISI 316L stainless steel in terms of dislocation patterns and internal stresses. *Acta Mater.* **52**, 3097–3110. (doi:10.1016/j.actamat.2004.03.011)
148. Kang G, Liu Y, Dong Y, Gao Q. 2011 Uniaxial Ratcheting Behaviors of Metals with Different Crystal Structures or Values of Fault Energy: Macroscopic Experiments. *J. Mater. Sci. Technol.* **27**, 453–459.
149. Taleb L, Cailletaud G. 2011 Cyclic accumulation of the inelastic strain in the 304L SS under stress control at room temperature: Ratcheting or creep? *Int. J. Plast.* **27**, 1936–1958. (doi:10.1016/j.ijplas.2011.02.001)
150. Facheris G, Janssens KGF, Foletti S. 2014 Multiaxial fatigue behavior of AISI 316L subjected to strain-controlled and ratcheting paths. *Int. J. Fatigue* **68**, 195–208. (doi:10.1016/j.ijfatigue.2014.05.003)
151. Delobelle P, Robinet P, Bocher L. 1995 Experimental study and phenomenological modelization of ratchet under uniaxial and biaxial loading on an austenitic stainless steel. *Int. J. Plast.* **11**, 295–330. (doi:10.1016/S0749-6419(95)00001-1)
152. Tavassoli AA, Mottot M, Petrequin P. 1988 Sequential creep-fatigue interaction in austenitic 316 L-SPH stainless steel. *Theor. Appl. Fract. Mech.* **10**, 49–57. (doi:10.1016/0167-8442(88)90056-0)
153. Rachdi F. 2015 Modélisation du comportement mécanique des aciers austénitiques inoxydables en fatigue pure et en fatigue-relaxation. Thèse de Doctorat, Université Pierre et Marie Curie - Paris VI.
154. Tavassoli A. 1986 Dislocation Concepts Applied to Fatigue Properties of Austenitic Stainless-Steels Including Time-Dependent Modes. *Philos. Mag. -Phys. Condens. Matter Struct. Defects Mech. Prop.* **54**, 521–538.
155. Eshelby JD. 1957 The Determination of the Elastic Field of an Ellipsoidal Inclusion, and Related Problems. *Proc. R. Soc. Lond. Math. Phys. Eng. Sci.* **241**, 376–396. (doi:10.1098/rspa.1957.0133)

156. Kroner E. 1961 Zur plastischen verformung des vielkristalls. *Acta Metall.* **9**, 155–161. (doi:10.1016/0001-6160(61)90060-8)
157. Berveiller M, Zaoui A. 1979 An extension of the self-consistent scheme to plastically-flowing polycrystals. *J. Mech. Phys. Solids* **26**, 325–344. (doi:10.1016/0022-5096(78)90003-0)
158. Hill R. 1965 A self-consistent mechanics of composite materials. *J. Mech. Phys. Solids* **13**, 213–222. (doi:10.1016/0022-5096(65)90010-4)
159. Hutchinson J. 1970 Elastic-Plastic Behaviour of Polycrystalline Metals and Composites. *Proc. R. Soc. Lond. Ser. -Math. Phys. Sci.* **319**, 247. (doi:10.1098/rspa.1970.0177)
160. Barbe F, Decker L, Jeulin D, Cailletaud G. 2001 Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates. Part 1: F.E. model. *Int. J. Plast.* **17**, 513–536. (doi:10.1016/S0749-6419(00)00061-9)
161. Barbe F, Forest S, Cailletaud G. 2001 Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates. Part 2: Results. *Int. J. Plast.* **17**, 537–563. (doi:10.1016/S0749-6419(00)00062-0)
162. Hutchinson JW. 1976 Bounds and Self-Consistent Estimates for Creep of Polycrystalline Materials. *Proc. R. Soc. Lond. Math. Phys. Eng. Sci.* **348**, 101–127. (doi:10.1098/rspa.1976.0027)
163. Molinari A, Canova GR, Ahzi S. 1987 A self consistent approach of the large deformation polycrystal viscoplasticity. *Acta Metall.* **35**, 2983–2994. (doi:10.1016/0001-6160(87)90297-5)
164. Molinari A, Ahzi S, Kouddane R. 1997 On the self-consistent modeling of elastic-plastic behavior of polycrystals. *Mech. Mater.* **26**, 43–62. (doi:10.1016/S0167-6636(97)00017-3)
165. Molinari A. 2016 Private communication.
166. Zaoui A. 2002 Continuum micromechanics: Survey. *J. Eng. Mech.* **128**, 808–816. (doi:10.1061/(ASCE)0733-9399(2002)128:8(808))
167. Mercier S, Jacques N, Molinari A. 2005 Validation of an interaction law for the Eshelby inclusion problem in elasto-viscoplasticity. *Int. J. Solids Struct.* **42**, 1923–1941. (doi:10.1016/j.ijsolstr.2004.08.016)
168. Kouddane R, Molinari A, Canova GR. 1993 Self-consistent modelling of heterogeneous viscoelastic and elastoviscoplastic materials. In *In: Teodosiu, C., Raphanel, J., Sidoroff, F. (Eds.), Large Plastic Deformation*, Rotterdam: Balkema.
169. Mercier S, Molinari A. 2009 Homogenization of elastic-viscoplastic heterogeneous materials: Self-consistent and Mori-Tanaka schemes. *Int. J. Plast.* **25**, 1024–1048. (doi:10.1016/j.ijplas.2008.08.006)
170. Mareau C, Favier V, Berveiller M. 2009 Micromechanical modeling coupling time-independent and time-dependent behaviors for heterogeneous materials. *Int. J. Solids Struct.* **46**, 223–237. (doi:10.1016/j.ijsolstr.2008.08.028)
171. Masson R, Bornert M, Suquet P, Zaoui A. 2000 An affine formulation for the prediction of the effective properties of nonlinear composites and polycrystals. *J. Mech. Phys. Solids* **48**, 1203–1227. (doi:10.1016/S0022-5096(99)00071-X)

172. Lahellec N, Suquet P. 2007 On the effective behavior of nonlinear inelastic composites: I. Incremental variational principles. *J. Mech. Phys. Solids* **55**, 1932–1963. (doi:10.1016/j.jmps.2007.02.003)
173. Lahellec N, Suquet P. 2007 On the effective behavior of nonlinear inelastic composites: II: A second-order procedure. *J. Mech. Phys. Solids* **55**, 1964–1992. (doi:10.1016/j.jmps.2007.02.004)
174. Lahellec N, Suquet P. 2013 Effective response and field statistics in elasto-plastic and elasto-viscoplastic composites under radial and non-radial loadings. *Int. J. Plast.* **42**, 1–30. (doi:10.1016/j.ijplas.2012.09.005)
175. Suquet P, Lahellec N. 2014 Elasto-plasticity of Heterogeneous Materials at Different Scales. *Procedia IUTAM* **10**, 247–262. (doi:10.1016/j.piutam.2014.01.021)
176. Badulescu C, Lahellec N, Suquet P. 2015 Field statistics in linear viscoelastic composites and polycrystals. *Eur. J. Mech. - ASolids* **49**, 329–344. (doi:10.1016/j.euromechsol.2014.07.012)
177. Mareau C, Berbenni S. 2015 An affine formulation for the self-consistent modeling of elasto-viscoplastic heterogeneous materials based on the translated field method. *Int. J. Plast.* **64**, 134–150. (doi:10.1016/j.ijplas.2014.08.011)
178. Robert C, Mareau C. 2015 A comparison between different numerical methods for the modeling of polycrystalline materials with an elastic–viscoplastic behavior. *Comput. Mater. Sci.* **103**, 134–144. (doi:10.1016/j.commatsci.2015.03.028)
179. Sauzay M. 2007 Cubic elasticity and stress distribution at the free surface of polycrystals. *Acta Mater.* **55**, 1193–1202. (doi:10.1016/j.actamat.2006.09.035)
180. Guilhem Y, Stephan J-M, Curtit F, Cailletaud G, Basseville S. 2012 *Numerical Study of the Short Crack Initiation in Polycrystalline Aggregates*. New York: Amer Soc Mechanical Engineers.
181. Frederick CO, Armstrong PJ. 1966 A mathematical representation of the multiaxial Bauschinger effect. , 1–26.
182. Pilvin P. 2003 SIDOLO, version 2.4495, notice d’utilisation. Université de Bretagne-Sud.
183. Abdul-Latif A. 2004 Pertinence of the grains aggregate type on the self-consistent model responses. *Int. J. Solids Struct.* **41**, 305–322. (doi:10.1016/j.ijsolstr.2003.09.014)
184. Heraud S. 1998 Du polycristal au multicristal : élaboration d’un mésoscope numérique pour une analyse locale en élastoviscoplasticité. École Polytechnique.
185. Osterstock S, Robertson C, Sauzay M, Aubin V, Degallaix S. 2010 Stage I surface crack formation in thermal fatigue: A predictive multi-scale approach. *Mater. Sci. Eng. A* **528**, 379–390. (doi:10.1016/j.msea.2010.09.019)
186. Steckmeyer A, Sauzay M, Weidner A, Hieckmann E. 2012 Micromechanical modelling of the cyclic stress–strain behaviour of nickel polycrystals. *Int. J. Fatigue* **40**, 154–167. (doi:10.1016/j.ijfatigue.2011.10.019)
187. Sauzay M, Liu J, Rachdi F, Signor L, Ghidossi T, Villechaise P. 2014 Physically-based simulations of the cyclic behavior of FCC polycrystals. In *11th International Fatigue*

Congress, Pts 1 and 2 (eds G Clark, CH Wang), pp. 833–839. Stafa-Zurich: Trans Tech Publications Ltd.

188. Taylor GI. 1938 Plastic strain in metals. *Jpn. Inst. Met.* **62**, 307–324.
189. Reuss A. 1929 Berechnung der Fließgrenze von Mischkristallen auf Grund der Plastizitätsbedingung für Einkristalle. *ZAMM - J. Appl. Math. Mech. Z. Für Angew. Math. Mech.* **9**, 49–58. (doi:10.1002/zamm.19290090104)
190. Belkhabbaz A. 2013 *Contribution à l'étude du comportement élastoplastique d'agrégats polycristallins par homogénéisation numérique FFT*. Paris 13. See <http://www.theses.fr/2013PA132002>.
191. Belkhabbaz A, Bacroix B, Brenner. 2015 Investigation of the elastoplastic behavior of FCC polycrystals using a FFT numerical scheme. , 5–23.
192. Lebensohn RA, Liu Y, Ponte Castañeda P. 2004 On the accuracy of the self-consistent approximation for polycrystals: comparison with full-field numerical simulations. *Acta Mater.* **52**, 5347–5361. (doi:10.1016/j.actamat.2004.07.040)
193. Lebensohn RA, Tomé CN, Castañeda PP. 2007 Self-consistent modelling of the mechanical behaviour of viscoplastic polycrystals incorporating intragranular field fluctuations. *Philos. Mag.* **87**, 4287–4322. (doi:10.1080/14786430701432619)
194. Sauzay M. 2008 Analytical modelling of intragranular backstresses due to deformation induced dislocation microstructures. *Int. J. Plast.* **24**, 727–745. (doi:10.1016/j.ijplas.2007.07.004)
195. Norton FH. 1929 *The creep of steel at high temperatures*. 1st Edition. New York: McGraw-Hill Book Company.
196. Huang L. In press. Simulation micromécanique et étude expérimentale de l'endommagement par fluage des aciers austénitiques inoxydables. PhD Dissertation, Université Pierre et Marie Curie - Paris VI.
197. Bari S, Hassan T. 2000 Anatomy of coupled constitutive models for ratcheting simulation. *Int. J. Plast.* **16**, 381–409. (doi:10.1016/S0749-6419(99)00059-5)
198. Pilvin P, Cailletaud G. 1991 Intergranular and Transgranular Hardening in Viscoplasticity. In *Creep in Structures*, pp. 171–178. Springer, Berlin, Heidelberg. (doi:10.1007/978-3-642-84455-3_21)
199. Cailletaud G, Pilvin P. 1994 Utilisation de modèles polycristallins pour le calcul par éléments finis. *Rev. Eur. Éléments* **3**, 515–541. (doi:10.1080/12506559.1994.10511147)
200. Gérard C, Bacroix B, Bornert M, Cailletaud G, Crépin J, Leclercq S. 2009 Hardening description for FCC materials under complex loading paths. *Comput. Mater. Sci.* **45**, 751–755. (doi:10.1016/j.commatsci.2008.08.027)
201. Abdeljaoued D, Ben Naceur I, Saï K, Cailletaud G. 2009 A new polycrystalline plasticity model to improve ratchetting strain prediction. *Mech. Res. Commun.* **36**, 309–315. (doi:10.1016/j.mechrescom.2008.09.012)
202. Hlilou A, Naceur I, Saï K, Gérard C, Forest S, Cailletaud G. 2009 Generalization of the polycrystalline β -model: Finite element assessment and application to softening material behavior. *Comput. Mater. Sci.* **45**, 1104–1112. (doi:10.1016/j.commatsci.2009.01.015)

203. Cailletaud G, Sai K. 2008 A polycrystalline model for the description of ratchetting: Effect of intergranular and intragranular hardening. *Mater. Sci. Eng. A* **480**, 24–39. (doi:10.1016/j.msea.2007.06.071)
204. Bari S, Hassan T. 2001 Kinematic hardening rules in uncoupled modeling for multiaxial ratcheting simulation. *Int. J. Plast.* **17**, 885–905. (doi:10.1016/S0749-6419(00)00031-0)
205. Bari S, Hassan T. 2002 An advancement in cyclic plasticity modeling for multiaxial ratcheting simulation. *Int. J. Plast.* **18**, 873–894. (doi:10.1016/S0749-6419(01)00012-2)
206. Portier L, Calloch S, Marquis D, Geyer P. 2000 Ratchetting under tension–torsion loadings: experiments and modelling. *Int. J. Plast.* **16**, 303–335. (doi:10.1016/S0749-6419(99)00056-X)
207. Sai K. 2011 Multi-mechanism models: Present state and future trends. *Int. J. Plast.* **27**, 250–281. (doi:10.1016/j.ijplas.2010.05.003)
208. Liu J, Sauzay M, Robertson C. 2011 Cyclic behavior of 316L steel predicted by means of finite element computations. *Procedia Eng.* **10**, 2502–2507. (doi:10.1016/j.proeng.2011.04.412)
209. Dong Y, Kang G, Yu C. 2014 A dislocation-based cyclic polycrystalline visco-plastic constitutive model for ratchetting of metals with face-centered cubic crystal structure. *Comput. Mater. Sci.* **91**, 75–82. (doi:10.1016/j.commatsci.2014.04.030)
210. Feaugas X, Pilvin P. 2009 A Polycrystalline Approach to the Cyclic Behaviour of f.c.c. Alloys – Intra-Granular Heterogeneity. *Adv. Eng. Mater.* **11**, 703–709. (doi:10.1002/adem.200900039)
211. Cailletaud G, Doquet V, Pineau A. 1989 Prediction of macroscopic multiaxial behaviour from microstructural observations. In *3rd International Conference on Biaxial/Multiaxial Fatigue*,
212. Pilvin P. 1990 Approche multiéchelles pour la prévision du comportement anélastique des métaux. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI.
213. Pilvin P. 1996 The contribution of micromechanical approaches to the modelling of inelastic behaviour. In: Pineau, A., Cailletaud, G., Lindle, T. (EDs.). pp. 3–19. Saint-Germain, France.
214. Dunne F, Petrinic N. 2005 *Introduction to Computational Plasticity*. Oxford, New York: Oxford University Press.
215. Mecking H, Kocks UF. 1981 Kinetics of flow and strain-hardening. *Acta Metall.* **29**, 1865–1875. (doi:10.1016/0001-6160(81)90112-7)
216. Feaugas X. 1999 On the origin of the tensile flow stress in the stainless steel AISI 316L at 300 K: back stress and effective stress. *Acta Mater.* **47**, 3617–3632. (doi:10.1016/S1359-6454(99)00222-0)
217. Lepistö T. 1983 Microstructural features in fatigued copper single crystals with axes parallel to [111] and close to [011]. *Ultramicroscopy* **12**, 271. (doi:10.1016/0304-3991(83)90283-8)

218. Lepistö TK, Kuokkala V-T, Kettunen PO. 1986 Dislocation arrangements in cyclically deformed copper single crystals. *Mater. Sci. Eng.* **81**, 457–463. (doi:10.1016/0025-5416(86)90283-1)
219. Li P, Zhang ZF, Li XW, Li SX, Wang ZG. 2009 Effect of orientation on the cyclic deformation behavior of silver single crystals: Comparison with the behavior of copper and nickel single crystals. *Acta Mater.* **57**, 4845–4854. (doi:10.1016/j.actamat.2009.06.048)
220. Videm M, Ryum N. 1996 Cyclic deformation of [001] aluminium single crystals. *Mater. Sci. Eng. A* **219**, 1–10. (doi:10.1016/S0921-5093(96)10261-6)
221. Lepistö T, Kettunen P. 1982 The PSB structure in single-slip oriented copper single crystals. *Scr. Metall.* **16**, 1145–1148. (doi:10.1016/0036-9748(82)90084-9)
222. Lukáš P, Kunz L, Svoboda M. 1999 Stress–strain response and fatigue life of copper single crystals cyclically loaded with a positive mean stress. *Mater. Sci. Eng. A* **272**, 31–37. (doi:10.1016/S0921-5093(99)00462-1)
223. Lukáš P, Kunz L. 1994 Comparison of fatigue behaviour of single crystals and polycrystals. *Mater. Sci. Eng. A* **189**, 1–7. (doi:10.1016/0921-5093(94)90395-6)
224. Lukáš P, Kunz L, Krejčí J. 1992 Fatigue behaviour of single crystals of a Cu-22%Zn alloy. *Mater. Sci. Eng. A* **158**, 177–183. (doi:10.1016/0921-5093(92)90006-M)
225. Wang Z. 1994 Cyclic stress-strain response of alpha brass single crystals oriented for easy glide. *Mater. Sci. Eng. A* **183**, L13–L17. (doi:10.1016/0921-5093(94)90916-4)
226. Takeuchi T. 1976 Orientation Dependence of Work Hardening of Copper Single Crystals near the [111] Axis. *J. Phys. Soc. Jpn.* **41**, 490–495. (doi:10.1143/JPSJ.41.490)
227. Lepistö TK, Kettunen PO. 1986 Comparison of the cyclic stress-strain behaviour of single- and $\langle 111 \rangle$ multiple-slip-oriented copper single crystals. *Mater. Sci. Eng.* **83**, 1–15. (doi:10.1016/0025-5416(86)90169-2)
228. Polák J, Petre nec M, Man J. 2005 Dislocation structure and surface relief in fatigued metals. *Mater. Sci. Eng. A* **400–401**, 405–408. (doi:10.1016/j.msea.2005.01.064)
229. Tippelt B, Bretschneider J, Hähner P. 1997 The Dislocation Microstructure of Cyclically Deformed Nickel Single Crystals at Different Temperatures. *Phys. Status Solidi A*, 11–26.
230. Frank F, Read W. 1950 Multiplication Processes for Slow Moving Dislocations. *Phys. Rev.* **79**, 722–723. (doi:10.1103/PhysRev.79.722)
231. Differt K, Essmann U. 1993 Dynamical model of the wall structure in persistent slip bands of fatigued metals I. Dynamical model of edge dislocation walls. *Mater. Sci. Eng. A* **164**, 295–299. (doi:10.1016/0921-5093(93)90681-4)
232. Mughrabi H. 2009 Cyclic Slip Irreversibilities and the Evolution of Fatigue Damage. *Metall. Mater. Trans. B-Process Metall. Mater. Process. Sci.* **40**, 431–453. (doi:10.1007/s11663-009-9240-4)
233. Vogt J-B, Magnin T, Foct J. 1993 Effective Stresses and Microstructure in Cyclically Deformed 316l Austenitic Stainless Steel: Effect of Temperature and Nitrogen Content. *Fatigue Fract. Eng. Mater. Struct.* **16**, 555–564. (doi:10.1111/j.1460-2695.1993.tb00766.x)

234. Estrin Y, Mecking H. 1992 A remark in connection with ‘direct versus indirect dispersion hardening’. *Scr. Metall. Mater.* **27**, 647–648. (doi:10.1016/0956-716X(92)90355-I)
235. Essmann U, Mughrabi H. 1979 Annihilation of Dislocations During Tensile and Cyclic Deformation and Limits of Dislocation Densities. *Philos. Mag. -Phys. Condens. Matter Struct. Defects Mech. Prop.* **40**, 731–756.
236. Hähner P, Tippelt B, Holste C. 1998 On the dislocation dynamics of persistent slip bands in cyclically deformed f.c.c. metals. *Acta Mater.* **46**, 5073–5084. (doi:10.1016/S1359-6454(98)00161-X)
237. Friedel J. 1964 Motion of dislocations glide. In *Dislocations*, pp. 49–75. Pergamon. (doi:10.1016/B978-0-08-013523-6.50008-9)
238. Glicksman M. 1999 *Diffusion in Solids: Field Theory, Solid-State Principles, and Applications*. Wiley. See <http://eu.wiley.com/WileyCDA/WileyTitle/productCd-0471239720.html>.
239. Aslanides A, Pontikis V. 2000 Numerical study of the athermal annihilation of edge-dislocation dipoles. *Philos. Mag. A* **80**, 2337–2353. (doi:10.1080/01418610008216476)
240. Brinckmann S, Sivanesapillai R, Hartmaier A. 2011 On the formation of vacancies by edge dislocation dipole annihilation in fatigued copper. *Int. J. Fatigue* **33**, 1369–1375. (doi:10.1016/j.ijfatigue.2011.05.004)
241. Jaoul B. 1964 In *Etude de la plasticité et application aux métaux*, p. 600. Dunod.
242. Antonopoulos JG, Brown LM, Winter AT. 1976 Vacancy dipoles in fatigued copper. *Philos. Mag.* **34**, 549–563. (doi:10.1080/14786437608223793)
243. Kassner ME, Wall MA. 1999 Microstructure and mechanisms of cyclic deformation in aluminum single crystals at 77 K: Part II. Edge dislocation dipole heights. *Metall. Mater. Trans. A* **30**, 777–779. (doi:10.1007/s11661-999-0069-x)
244. Gentet D, Feaugas X, Risbet M, Lejeail Y, Pilvin P. 2011 Several aspects of the temperature history in relation to the cyclic behaviour of an austenitic stainless steel. *Mater. Sci. Eng. A* **528**, 7696–7707. (doi:10.1016/j.msea.2011.06.048)
245. Essmann U, Differt K. 1996 Dynamic model of the wall structure in persistent slip bands of fatigued metals II. The wall spacing and the temperature dependence of the yield stress in saturation. *Mater. Sci. Eng. A* **208**, 56–68. (doi:10.1016/0921-5093(95)10063-6)
246. Yu D, Chen X, Yu W, Chen G. 2012 Thermo-viscoplastic modeling incorporating dynamic strain aging effect on the uniaxial behavior of Z2CND18.12N stainless steel. *Int. J. Plast.* **37**, 119–139. (doi:10.1016/j.ijplas.2012.05.001)
247. Schwab A, Holste C. 2002 Prediction of the cyclic stress–strain curve of polycrystalline nickel. *Acta Mater.* **50**, 289–303. (doi:10.1016/S1359-6454(01)00355-X)
248. Mizuno M, Mima Y, Abdel-Karim M, Ohno N. 1999 Uniaxial Ratchetting of 316FR Steel at Room Temperature— Part I: Experiments. *J. Eng. Mater. Technol.* **122**, 29–34. (doi:10.1115/1.482761)
249. Auzoux Q. 2004 Fissuration en relaxation des aciers inoxydables austénitiques - Influence de l’écrouissage sur l’endommagement intergranulaire. PhD Dissertation, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.

250. Pham M-S, Holdsworth SR. 2014 Evolution of Relationships Between Dislocation Microstructures and Internal Stresses of AISI 316L During Cyclic Loading at 293 K and 573 K (20 degrees C and 300 degrees C). *Metall. Mater. Trans. -Phys. Metall. Mater. Sci.* **45A**, 738–751. (doi:10.1007/s11661-013-1981-7)
251. Escaig B. 1968 Thèse de Doctorat, Université d'Orsay Paris XI, Paris.
252. Rohatgi A, Vecchio KS, Iii GTG. 2001 The influence of stacking fault energy on the mechanical behavior of Cu and Cu-Al alloys: Deformation twinning, work hardening, and dynamic recovery. *Metall. Mater. Trans. A* **32**, 135–145. (doi:10.1007/s11661-001-0109-7)
253. Tabata T, Takagi K, Fujita H. 1975 The Effect of Grain Size and Deformation Sub-structure on Mechanical Properties of Polycrystalline Copper and Cu–Al Alloys. *Trans. Jpn. Inst. Met.* **16**, 569–579. (doi:10.2320/matertrans1960.16.569)
254. Kuhlmann-wilsdorf D, Wilsdorf H. 1953 The surface structures of deformed aluminium, copper, silver and alpha-brass and their theoretical interpretation. *Acta Metall.* **1**, 394–413. (doi:10.1016/0001-6160(53)90122-9)
255. Berveiller M, Audit P, Baro R. 1972 Influence des interactions entre les grains sur la limite élastique des polycristaux métalliques CFC. *Rev. Phys. Appl.* **7**, 283–290.
256. Hansen N. 1977 The effect of grain size and strain on the tensile flow stress of aluminium at room temperature. *Acta Metall.* , 863–869.
257. Hall EO. 1951 The Deformation and Ageing of Mild Steel: III Discussion of Results. *Proc. Phys. Soc. Sect. B* **64**, 747. (doi:10.1088/0370-1301/64/9/303)
258. Petch N. 1953 The Cleavage Strength of Polycrystals. *J. Iron Steel Inst.* **174**, 25–28.
259. Haddou H, Gaudin C, Feaugas X. 2001 Stacking fault energy (s.f.e.) and grain size effects (d) on the tensile behaviour of f.c.c. polycrystalline alloys at 300 K: Back stress and effective stress evolutions. *J. Phys. IV* **11**, Pr4–283–Pr4–291. (doi:10.1051/jp4:2001435)
260. Hansen N. 2004 Hall–Petch relation and boundary strengthening. *Scr. Mater.* **51**, 801–806. (doi:10.1016/j.scriptamat.2004.06.002)
261. Meakin JD, Petch NJ. 1974 Strain-hardening of polycrystals: The α -brasses. *Philos. Mag. J. Theor. Exp. Appl. Phys.* **29**, 1149–1156. (doi:10.1080/14786437408226599)
262. Thompson AW, Baskes MI, Flanagan WF. 1973 The dependence of polycrystal work hardening on grain size. *Acta Metall.* **21**, 1017–1028. (doi:10.1016/0001-6160(73)90158-2)
263. Feaugas X, Haddou H. 2007 Effects of grain size on dislocation organization and internal stresses developed under tensile loading in fcc metals. *Philos. Mag.* **87**, 989–1018. (doi:10.1080/14786430601019441)
264. Cordero ZC, Knight BE, Schuh CA. 2016 Six decades of the Hall–Petch effect – a survey of grain-size strengthening studies on pure metals. *Int. Mater. Rev.* **61**, 495–512. (doi:10.1080/09506608.2016.1191808)
265. Flipon B, de la Cruz LG, Hug E, Keller C, Barbe F. 2017 Elaboration of austenitic stainless steel samples with bimodal grain size distributions and investigation of their mechanical behavior. *AIP Conf. Proc.* **1896**, 200007. (doi:10.1063/1.5008244)

266. Berbenni S, Favier V, Berveiller M. 2007 Impact of the grain size distribution on the yield stress of heterogeneous materials. *Int. J. Plast.* **23**, 114–142. (doi:10.1016/j.ijplas.2006.03.004)
267. Berbenni S, Wagner F, Allain-Bonasso N. 2014 On the Roles of Grain Size Dispersion and Microscale Hall-Petch Relation on the Plastic Behavior of Polycrystalline Metals. *Mater. Trans.* **55**, 39–43. (doi:10.2320/matertrans.MA201307)
268. Kuhlmann-wilsdorf D, Wilsdorf H. 1953 The surface structures of deformed aluminium, copper, silver and alpha-brass and their theoretical interpretation. *Acta Metall.* **1**, 394–413. (doi:10.1016/0001-6160(53)90122-9)
269. Fourie JT, Wilsdorf HGF. 1959 A study of slip lines in α -brass as revealed by the electron microscope. *Acta Metall.* **7**, 339–349. (doi:10.1016/0001-6160(59)90200-7)
270. Fourie JT. 1960 The life history of individual slip lines during the plastic deformation of α -brass single crystals. *Acta Metall.* **8**, 88–96. (doi:10.1016/0001-6160(60)90089-4)
271. Brindley BJ, Corderoy DJH, Honeycombe RWK. 1962 Yield points and luders bands in single crystals of copper-base alloys. *Acta Metall.* **10**, 1043–1050. (doi:10.1016/0001-6160(62)90073-1)
272. Hu X, Margolin H, Duan X, Nourbakhsh S. 1992 Luders band propagation and cross slip in 70-30 α -brass single crystals. *Scr. Metall. Mater.* **26**, 1257–1262. (doi:10.1016/0956-716X(92)90573-W)
273. Neuhauser H, Koropp J, Heege R. 1975 Electron microscopic studies in the yield region of 70/30- α -brass single crystals—I. The mode of slip. *Acta Metall.* **23**, 441–453. (doi:10.1016/0001-6160(75)90083-8)
274. Piercy GR, Cahn RW, Cottrell AH. 1955 A study of primary and conjugate slip in crystals of alpha-brass. *Acta Metall.* **3**, 331–338. (doi:10.1016/0001-6160(55)90037-7)
275. Ardley GW, Cottrell AH. 1953 Yield points in brass crystals. *Proc R Soc Lond A* **219**, 328–340. (doi:10.1098/rspa.1953.0150)
276. Charsley P, Desvaux MPE. 1969 Slip line Studies of the Deformation of Copper–12 at% Aluminium Crystals in Stage I. *Phys. Status Solidi B* **34**, 665–676. (doi:10.1002/pssb.19690340228)
277. Mori T, Fujita H. 1982 Effect of dislocation structure on the flow stress in Cu-3 at.% Al single crystals. *Philos. Mag. A* **46**, 91–104. (doi:10.1080/01418618208236210)
278. Mitchell JW, Chevrier JC, Hockey BJ, Monaghan Jr. JP. 1967 THE NATURE AND FORMATION OF BANDS OF DEFORMATION IN SINGLE CRYSTALS OF α -PHASE COPPER–ALUMINIUM ALLOYS. *Can. J. Phys.* **45**, 453–479. (doi:10.1139/p67-041)
279. Byun TS, Hashimoto N. 2006 Strain hardening and long-range internal stress in the localized deformation of irradiated polycrystalline metals. *J. Nucl. Mater.* , 123–130.
280. Panin VE, Armstrong RW. 2016 Hall-Petch analysis for temperature and strain rate dependent deformation of polycrystalline lead. *Phys. Mesomech.* **19**, 35–40. (doi:10.1134/S1029959916010045)
281. Kahloun C, Monnet G, Queyreau S, Le LT, Franciosi P. 2016 A comparison of collective dislocation motion from single slip quantitative topographic analysis during in-situ AFM

- room temperature tensile tests on Cu and Fe α crystals. *Int. J. Plast.* **84**, 277–298. (doi:10.1016/j.ijplas.2016.06.002)
282. Perrin C, Berbenni S, Vehoff H, Berveiller M. 2010 Role of discrete intragranular slip on lattice rotations in polycrystalline Ni: Experimental and micromechanical studies. *Acta Mater.* **58**, 4639–4649. (doi:10.1016/j.actamat.2010.04.033)
283. Kramer DE, Savage MF, Levine LE. 2005 AFM observations of slip band development in Al single crystals. *Acta Mater.* **53**, 4655–4664. (doi:10.1016/j.actamat.2005.06.019)
284. Lekbir C, Alami HE, Conforto E, Huvier C, Feaugas X, Sabot R, Creus J. 2010 SEM In-situ Deformed Nickel: When the Emergence of Slip Bands Improves Hydrogen Adsorption. Rio de Janeiro.
285. Weidner A, Glage A, Biermann H. 2010 In-situ characterization of the microstructure evolution during cyclic deformation of novel cast TRIP steel. *Procedia Eng.* **2**, 1961–1971. (doi:10.1016/j.proeng.2010.03.211)
286. Man J, Valtr M, Weidner A, Petre nec M, Obrtlík K, Polák J. 2010 AFM study of surface relief evolution in 316L steel fatigued at low and high temperatures. *Procedia Eng.* **2**, 1625–1633. (doi:10.1016/j.proeng.2010.03.175)
287. Collard C, Favier V, Berbenni S, Berveiller M. 2010 Role of discrete intra-granular slip bands on the strain-hardening of polycrystals. *Int. J. Plast.* **26**, 310–328. (doi:10.1016/j.ijplas.2009.07.004)
288. Mura T. 1987 *Micromechanics of Defects in Solids*. 2nd edn. Springer Netherlands. See [//www.springer.com/us/book/9789024732562](http://www.springer.com/us/book/9789024732562).
289. Takeuchi T. 1975 Work hardening of copper single crystals with multiple glide orientations. *Mater. Trans. - Jpn. Inst. Met.* , 629–640.
290. Mitchell TE, Thornton PR. 1963 The work-hardening characteristics of Cu and α -brass single crystals between 4•2 and 500°K. *Philos. Mag. J. Theor. Exp. Appl. Phys.* **8**, 1127–1159. (doi:10.1080/14786436308207340)
291. Jackson PJ. 1968 Double coplanar slip in silver. *Scr. Metall.*
292. Smith DR, Fickett FR. 1995 Low-Temperature Properties of Silver. *J. Res. Natl. Inst. Stand. Technol.* , 120–171.
293. Göttler E. 1973 Versetzungsstruktur und verfestigung von [100]-kupfereinkristallen: I. versetzungsanordnung und zellstruktur zugverformter kristalle. *Philos. Mag.* , 1057–1076.
294. Hansen N. 1958 Plastic deformation of nickel single crystals at low temperatures. *Philos. Mag.* , 384–418.
295. Hosford WF, Fleischer R., Backofen WA. 1960 Tensile deformation of aluminum single crystal. *Acta Metall.* , 187–199.
296. Bhogra M, Ramamurty U, Waghmare UV. 2014 Temperature-dependent stability of stacking faults in Al, Cu and Ni: first-principles analysis. *J. Phys. Condens. Matter* **26**, 385402. (doi:10.1088/0953-8984/26/38/385402)

297. Rémy L, Pineau A, Thomas B. 1978 Temperature dependence of stacking fault energy in close-packed metals and alloys. *Mater. Sci. Eng.* **36**, 47–63. (doi:10.1016/0025-5416(78)90194-5)
298. Shevlin CM. 1969 Temperature dependence of stacking fault energy in a Cu-30w%Zn alloy. PhD Dissertation, University of Arizona.
299. Latanision R, Ruff A. 1971 Temperature Dependence of Stacking Fault Energy in Fe-Cr-Ni Alloys. *Metall. Trans.* **2**, 505–+. (doi:10.1007/BF02663341)
300. Lecroisey F, Thomas B. 1970 On the variation of the intrinsic stacking fault energy with temperature in Fe-18 Cr-12 Ni alloys. *Phys. Status Solidi A* **2**, K217–K220. (doi:10.1002/pssa.19700020429)
301. Wang S, Murr LE. 1980 Effect of prestrain and stacking-fault energy on the application of the Hall-Petch relation in FCC metals and alloys. *Metallography.* , 203–224.
302. Armstrong RW. 1970 The influence of polycrystal grain size on several mechanical properties of materials. *Metall. Mater. Trans. B* **1**, 1169–1176. (doi:10.1007/BF02900227)
303. Kashyap BP, Tangri K. 1995 On the Hall-Petch relationship and substructural evolution in type 316L stainless steel. *Acta Metall. Mater.* **43**, 3971–3981. (doi:10.1016/0956-7151(95)00110-H)
304. Phillips WL, Armstrong RW. 1972 The strain dependence of the flow stress-grain size relation for 70:30 brass. *Metall. Trans.* **3**, 2571–2577. (doi:10.1007/BF02644231)
305. Schwartz J, Fandeur O, Rey C. 2013 Numerical approach of cyclic behaviour of 316LN stainless steel based on a polycrystal modelling including strain gradients. *Int. J. Fatigue* **55**, 202–212. (doi:10.1016/j.ijfatigue.2013.07.003)
306. Singh KK, Sangal S, Murty GS. 2002 Hall-Petch behaviour of 316L austenitic stainless steel at room temperature. *Mater. Sci. Technol.* **18**, 165–172. (doi:10.1179/026708301125000384)
307. Thompson AW. 1977 Effect of grain size on work hardening in nickel. *Acta Metall.* **25**, 83–86. (doi:10.1016/0001-6160(77)90249-8)
308. Gaudin C. 2002 Etude des mécanismes associés au rochet cyclique d'un acier austénitique AISI 316L. Université de Technologie Compiègne.
309. Delobelle P. 1989 Etude expérimentale de l'effet de rochet de traction-torsion d'un acier inoxydable 17-12 Mo-SPH, de 20 A 650° C. *J. Nucl. Mater.* **166**, 364–378. (doi:10.1016/0022-3115(89)90233-X)
310. Doquet V. 1989 Comportement et endommagement de deux aciers à structure cubique centrée et cubique à faces centrées, en fatigue oligocyclique, sous chargement multiaxial non proportionnel. Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.
311. Robiliard M. 1989 Etude de l'endommagement et de la rupture en fatigue oligocyclique multiaxial. PhD Dissertation, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.
312. Brown L. 2002 Linear Work-Hardening and Secondary Slip in Crystals. In *Dislocation in Solids*, edited by F.R.N Nabarro and M.S. Duesbery, Elsevier.

313. Neuhäuser H, Arkan OB, Flor H. 1988 Dynamics of slip band formation in fcc alloys. *Czechoslov. J. Phys. B* **38**, 511–518. (doi:10.1007/BF01597466)
314. McInTeer W, Thompson AW, Bernstein IM. 1980 The effect of hydrogen on the slip character of nickel. *Acta Metall.* , 887–894.
315. Aubert I, Olive J-M, Saintier N. 2010 The effect of internal hydrogen on surface slip localisation on polycrystalline AISI 316L stainless steel. *Mater. Sci. Eng. A* **527**, 5858–5866. (doi:10.1016/j.msea.2010.05.062)
316. Kahloun C, Le LT, Monnet G, Chavanne M-H, Ait E, Franciosi P. 2013 Topological analysis of $\{1\ 1\ 0\}$ slip in an α -iron crystal from in situ atomic force microscopy. *Acta Mater.* **61**, 6453–6465. (doi:10.1016/j.actamat.2013.07.023)
317. Girardin G, Huvier C, Delafosse D, Feaugas X. 2015 Correlation between dislocation organization and slip bands: TEM and AFM investigations in hydrogen-containing nickel and nickel–chromium. *Acta Mater.* **91**, 141–151. (doi:10.1016/j.actamat.2015.03.016)
318. Sharp JV. 1974 Deformation of neutron irradiated copper alloys. *Acta Metall.* **22**, 449–457. (doi:10.1016/0001-6160(74)90097-2)
319. Makin MJ, Sharp JV. 1965 A Model of “Lattice” Hardening in Irradiated Copper Crystals with the External Characteristics of “Source” Hardening. *Phys. Status Solidi B* **9**, 109–118. (doi:10.1002/pssb.19650090114)
320. Sauzay, Gilormini. 2000 Surface and cyclic microplasticity. *Fatigue Fract. Eng. Mater. Struct.* **23**, 573–579. (doi:10.1046/j.1460-2695.2000.00307.x)
321. Sauzay M, Gilormini P. 2002 Influence of surface effects on fatigue of microcracks nucleation. *Theor. Appl. Fract. Mech.* **38**, 53–62. (doi:10.1016/S0167-8442(02)00080-0)
322. Sicaud B. 2017 Communication privée.
323. Kalidindi S. 2001 Modeling anisotropic strain hardening and deformation textures in low stacking fault energy FCC metals. *Int. J. Plast.* , 837–860.
324. Mott N. 1952 In *Imperfections in Nearly Perfect Crystals*, p. 173. New York: John Wiley and Sons.
325. Suzuki T, Takeuchi S, Yoshinaga H. 1991 Dislocation Motion in the Field of a Random Distribution of Point Obstacles: Solution Hardening. In *Dislocation Dynamics and Plasticity*, pp. 32–46. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag.
326. Estrin Y, Kubin LP. 1991 Plastic instabilities: phenomenology and theory. *Mater. Sci. Eng. A* **137**, 125–134. (doi:10.1016/0921-5093(91)90326-I)
327. McCormick PG. 1988 Theory of flow localisation due to dynamic strain ageing. *Acta Metall.* **36**, 3061–3067. (doi:10.1016/0001-6160(88)90043-0)
328. Louat N. 1981 On the theory of the portevin-le chatelier effect. *Scr. Metall.* **15**, 1167–1170. (doi:10.1016/0036-9748(81)90290-8)
329. van den Beukel A. 1975 Theory of the effect of dynamic strain aging on mechanical properties. *Phys. Status Solidi A* **30**, 197–206. (doi:10.1002/pssa.2210300120)

330. Smith AF. 1975 The Diffusion of Chromium in Type 316 Stainless Steel. *Mater. Sci.* , 375–378.
331. Mulford RA, Kocks UF. 1979 New observations on the mechanisms of dynamic strain aging and of jerky flow. *Acta Metall.* **27**, 1125–1134. (doi:10.1016/0001-6160(79)90130-5)
332. Kelly A, Knowles KM. 1970 *Crystallography and Crystal Defects*. 2nd edn. Wiley.
333. Smith DW. 1990 *Inorganic substances prelude study descriptive inorganic chemistry*. Cambridge University Press.
334. Clementi E, Raimondi DL, Reinhardt WP. 1967 Atomic Screening Constants from SCF Functions. II. Atoms with 37 to 86 Electrons. *J. Chem. Phys.* **47**, 1300–1307. (doi:10.1063/1.1712084)
335. Kroupa F. 1966 Dislocation dipoles and dislocations loops. *J. Phys. Colloq.* , 154–167.
336. Kroupa P. 1962 The interaction between prismatic dislocation loops and straight dislocations. part I. *Philos. Mag. J. Theor. Exp. Appl. Phys.* **7**, 783–801. (doi:10.1080/14786436208212669)
337. Brown LM. 2002 A dipole model for the cross-slip of screw dislocations in fee metals. *Philos. Mag. A* **82**, 1691–1711. (doi:10.1080/01418610208235684)
338. Erel C, Po G, Crosby T, Ghoniem N. 2017 Generation and interaction mechanisms of prismatic dislocation loops in FCC metals. *Comput. Mater. Sci.* **140**, 32–46. (doi:10.1016/j.commatsci.2017.07.043)
339. Feltner CE. 1966 The mechanism of prismatic dislocation loop formation in cyclically strained aluminium. *Philos. Mag. J. Theor. Exp. Appl. Phys.* **14**, 1219–1231. (doi:10.1080/14786436608224287)
340. Tetelman AS. 1962 The pinching-off of dislocation dipoles by glide. *Philos. Mag. J. Theor. Exp. Appl. Phys.* **7**, 1801–1816. (doi:10.1080/14786436208213847)
341. Antonopoulos JG, Winter AT. 1976 Weak-beam study of dislocation structures in fatigued copper. *Philos. Mag. J. Theor. Exp. Appl. Phys.* **33**, 87–95. (doi:10.1080/14786437608221093)
342. Kruml T. 2018 Communication privée.
343. Rao SI, Dimiduk DM, El-Awady JA, Parthasarathy TA, Uchic MD, Woodward C. 2015 Screw dislocation cross slip at cross-slip plane jogs and screw dipole annihilation in FCC Cu and Ni investigated via atomistic simulations. *Acta Mater.* **101**, 10–15. (doi:10.1016/j.actamat.2015.08.070)
344. Rasmussen T, Vegge, Leffers T, Pedersen OB, Jacobsen KW. 2000 Simulation of structure and annihilation of screw dislocation dipoles. *Philos. Mag. A* **80**, 1273–1290. (doi:10.1080/01418610008212115)
345. Mughrabi H. 2013 Microstructural fatigue mechanisms: Cyclic slip irreversibility, crack initiation, non-linear elastic damage analysis. *Int. J. Fatigue* **57**, 2–8. (doi:10.1016/j.ijfatigue.2012.06.007)
346. Prinz FB, Argon AS. 1980 Dislocation cell formation durinh plastic deformation of copper single crystals. *Phys. Status Solidi A.* , 741–753.

347. Kayali E., Plumtree A. 1982 Stress-substructure relationships in cyclically and monotonically deformed wavy slip mode metals. *Metall. Trans. A.* , 1033–1041.
348. Tabata T, Yamanaka S, Fujita H. 1978 In situ deformation of the [111] aluminum single crystals observed by high voltage electron microscopy. *Acta Metall.* **26**, 405–411. (doi:10.1016/0001-6160(78)90167-0)
349. Tabata T, Fujita H, Hiraoka M-A, Miyake S. 1982 The relationship between flow stress and dislocation behaviour in [111] aluminium single crystals. *Philos. Mag. A* **46**, 801–816. (doi:10.1080/01418618208236932)
350. Hirth JP, Lothe J. 1968 *Theory of Dislocations*. New York: McGraw-Hill Book Company.
351. Seidman DN, Balluffi RW. 1966 On the annealing of dislocation loops by climb. *Philos. Mag. J. Theor. Exp. Appl. Phys.* **13**, 649–654. (doi:10.1080/14786436608212661)
352. Heumann T, Imm R. 1968 Self-diffusion and isotope effect in γ -iron. *J. Phys. Chem. Solids* **29**, 1613–1621. (doi:10.1016/0022-3697(68)90103-0)
353. Delobelle P, Bouchou A. 1996 Behavior and modeling of a 17-12 SPH stainless steel under cyclic, uni and bidirectional, anisothermal loadings. Part II: Modeling. *Int. J. Plast.* **12**, 311–341. (doi:10.1016/S0749-6419(96)00010-1)
354. Sevillano JG. 1993 Flow stress and work hardening. In: Mughrabi H, editor. *Plastic deformation and fracture of materials*. pp. 19–88. Weinheim (FRG): VCH.
355. Bonneville J, Escaig B. 1979 Cross-slipping process and the stress-orientation dependence in pure copper. *Acta Metall.* **27**, 1477–1486. (doi:10.1016/0001-6160(79)90170-6)
356. Foreman AJE, Makin MJ. 1966 Dislocation movement through random arrays of obstacles. *Philos. Mag. J. Theor. Exp. Appl. Phys.* **14**, 911–924. (doi:10.1080/14786436608244762)
357. Sauzay M, Giroux PF, Goncalves D, Chen JC, Hölstrom. 2018 Physically-based modelling of the mechanical behavior of martensitic steels. Comparison with experimental data. Poitiers, France.
358. NIRM. 1996 Data sheets on the elevated-temperature stress relaxation properties of 18Cr-12Ni-Mo hot rolled stainless steel plate (SUS 316-HP).