ParisTech
INSTITUT DES SCIENCES ET TECHNOLOGIES
PARIS INSTITUTE OF TECHNOLOGY

MINES ParisTech

Ecole doctorale n° 432: Sciences des Métiers de l'Ingénieur

Doctorat ParisTech

T H È S E

pour obtenir le grade de docteur délivré par

l'École nationale supérieure des mines de Paris

Spécialité "Sciences et génie des matériaux"

présentée et soutenue publiquement par

Can Ngon NGUYEN

le 04 février 2010

Modélisation du comportement en plasticité et à rupture des aciers bainitiques irradiés

Directeur de thèse : **Georges CAILLETAUD**
Co-encadrement de la thèse : **Fabrice BARBE**

Jury

Mme. Clotilde BERDIN-MERIC	Professeur	Université Paris XI	Rapporteur
M. Ivan GUILLOT	Professeur	Université Paris XII	Rapporteur
M. Philippe BOMPARD	Professeur	École Centrale Paris	Examinateur
M. Fabrice BARBE	Maître de Conférence	INSA de Rouen	Examinateur
M. Bernard MARINI	Ingénieur de Recherche	CEA	Examinateur
M. Charles PETRY	Ingénieur de Recherche	EDF	Examinateur
M. Georges CAILLETAUD	Professeur	MINES PARISTECH	Directeur de thèse

MINES ParisTech
Centre des Matériaux
BP 87, F-91003 Evry cedex, FRANCE

T H E S E

Remerciements

Aux membres du jury

Je suis reconnaissant à Madame Clotilde Berdin, Messieurs Ivan Guillot, Philippe Bompard, qui m'ont fait l'honneur de participer au jury de ma thèse, pour leur relecture minutieuse ainsi que leur questions et remarques très pertinentes.

Aux membres du laboratoire

Je tiens tout d'abord à remercier Monsieur Estéban Busso, Directeur du Centre, pour m'avoir donné une occasion de travailler dans un laboratoire magnifique, Centre des Matériaux de l'Ecole des Mines de Paris.

Je suis sincèrement reconnaissant envers Andrey Musienko, Fabrice Barbe pour m'avoir très largement aidé, pour m'avoir donné des instructions scientifiques, des conseils concrets, des encouragements et pour étaient très patience et compréhension. Sans eux ce travail ne jamais voit le jour.

Merci Nikolay Osipov, Guillaume Abrivard, Doan Dinh Trung qui étaient toujours prêts à répondre mes questions, pour leur soutien amical et leurs contributions scientifiques. Merci Liliane Lociero pour les aides administratives et quotidiennes.

Un Grande Merci, je veux l'adresser à mon Directeur de Thèse, Monsieur Georges Cailletaud, merci pour la confiance, pour la liberté, pour le soutien, pour le courage. Je te remercie de m'avoir encadré malgré mon faible niveau de français et science. Trois années au Centres, j'ai fait un grand pas non seulement dans la connaissance scientifique mais aussi dans la méthode de travail, méthode de réfléchir.

Au CEA Saclay et EDF

Je tiens en premier lieu à exprimer ma reconnaissance envers Monsieur Bernard Marini pour son soutien, ses remarques pertinentes et les nombreuses discussions. Je veux le remercie également pour m'avoir fait la confiance, donné une grande liberté aux travaux. Je tiens à remercier Messieurs Ludovic Vincent, Charles Petry pour leurs remarques pertinentes, leurs discussions et leurs soutiens. Merci pour m'avoir donné une chance de travailler aux cœurs des célèbres noms CEA et EDF.

Au ma famille et mes amis

Je vous dédie ce mémoire pour toute l'attention, la confiance, le dévouement aussi les encouragements dont vous avez fait toute long de mon parcours. Un Grande Merci à toute ma famille, vous qui m'avoir donné des courages dans les moments critiques, et vous qui m'a grandement aidé à résoudre les tracas dans la vie quotidienne. Je tiens à remercier mes amis, merci pour toutes les discussions, tous les souvenirs formidables et tous les soutiens précieux.

Introduction

Les aciers faiblement alliés sont utilisés dans les réacteurs nucléaires pour la réalisation de différents équipements. Soumis à une irradiation neutronique induite par le fonctionnement du réacteur, ces matériaux présentent des évolutions notables de leur microstructure, avec en particulier l'apparition de défauts d'irradiation comme des boucles interstitielles, des amas lacunaires et des précipités. Ces défauts par interactions avec les dislocations conduisent à un durcissement et une fragilisation en relation directe avec la dose reçue par le matériau et éventuellement le flux neutronique.

Le comportement en plasticité hors irradiation des aciers bainitiques faiblement alliés commence à être connu et a fait l'objet de plusieurs modélisations élaborées à partir d'observations expérimentales et de modélisations à l'échelle atomique. Plusieurs thèses ont été supportées par EDF et le CEA dans le passé, en particulier, au Centre des Matériaux, celle de Nikolay Osipov, dont la présente thèse est le prolongement. Le modèle à développer adopte une démarche classique, en utilisant des éléments expérimentaux déjà connus, mais il se place de façon déterminée à l'échelle de la microstructure, et cherche à intégrer un maximum d'information de métallurgie physique. C'est dans cet esprit que l'on cherchera à introduire des microstructures réalistes en termes de morphologie et d'orientation cristalline, et qu'on adoptera un modèle de plasticité cristalline basé sur les densités de dislocations. Ce choix doit permettre de faciliter la prise en compte de l'interaction entre dislocations et défauts d'irradiations dans l'écriture des lois de la plasticité. Le modèle de plasticité sera alors utilisé en Eléments Finis pour réaliser des calculs d'agrégats polycristallins. Un tel agrégat est un élément de volume représentatif du mécanicien. Les résultats obtenus sur celui-ci seront donc considérés comme une donnée élémentaire dans la manipulation des modèles de rupture fragile sur des structures. Il se posera alors la question du statut de l'approche développée. On proposera d'adopter le terme d'*approche locale micromécanique*.

Le principal objectif de la thèse est donc le développement de cette nouvelle approche locale. Pour cette occasion, il faudra passer par deux autres étapes : le développement des modèles cristallographiques basés sur les densités de dislocations en petites et en grandes déformations ; la modification de ces modèles pour prendre en compte l'effet d'irradiation.

Le manuscrit est organisé en trois grandes parties. Tout d'abord, la première partie décrit les modèles qui seront utilisés ensuite. Le lecteur trouvera successivement quelques rapides rappels sur les aciers de cuve ; sur les dislocations comme source de plasticité, ainsi que sur les modèles qui résultent de cette analyse ; sur l'influence de l'irradiation sur les mécanismes de déformation et de rupture ; sur le phénomène de rupture fragile et sa modélisation classique.

La deuxième partie décrit successivement l'implémentation dans le code de calcul par éléments finis, les détails sur les algorithmes étant toutefois reportés en annexe, et les modifications proposées pour prendre en compte l'effet d'irradiation.

Dans la troisième partie, on applique l'ensemble des outils développés pour réaliser des simulations de la déformation d'agrégats bainitiques. On réalise donc avant tout l'identification des paramètres sur des essais préexistants, pour tout un lot de températures. On effectue ensuite

les calculs de microstructures, qui sont analysés en détails en termes de champs de contraintes et de déformations. La partie se termine enfin par une proposition d'approche micromécanique locale de la rupture.

On mentionnera également une partie renfermant plusieurs annexes, qui permettent de détailler notamment les méthodes numériques. On y discute les difficultés liées à la méthode d'intégration implicite ; on écrit *in extenso* les expressions donnant la forme des résidus et de la matrice jacobienne. On propose une stratégie pour accélérer les temps calcul. On discute des maillages.

Chaque partie est subdivisée en chapitres pour plus de lisibilité. La bibliographie est reportée en fin de document, mais de petites conclusions à la fin de chaque chapitre devraient permettre au lecteur de se retrouver facilement face à la progression du travail.

Table des matières

Introduction **2**

I Bibliographie **7**

1 Acier de cuve et microstructure **9**

1.1 Présentation de l'acier de cuve REP 9

1.2 Formation de bainite à partir d'austénite 10

1.2.1 Transformation en refroidissement continu (TRC) 10

1.2.2 Elaboration 11

1.2.3 Types de bainite 12

1.3 Les principaux constituants et leur répartition 12

1.3.1 Les inclusions de sulfure de manganèse (MnS) 12

1.3.2 La cémentite (Fe3C) 14

1.3.3 La matrice ferrite 15

1.4 Texture cristallographique 17

1.5 Représentation synthétique de la microstructure 17

1.6 Comportement macroscopique 18

1.6.1 Traction quasi-statique 18

1.6.2 Compression 18

1.6.3 Conclusion 19

2 Dislocations et plasticité cristalline **21**

2.1 Les types de dislocation et leurs mouvements 21

2.1.1 Dislocations : un glissement localisé 21

2.1.2 Dislocation coin 22

2.1.3 Dislocation vis 23

2.1.4 Dislocation mixte 23

2.2 Multiplication 24

2.3 Interaction 24
2.3.1 Interaction avec le réseau 24
2.3.2 Interaction avec des défauts ponctuels 24
2.3.3 Interaction avec des autres dislocations 26
2.3.4 Interaction avec précipité 26
2.3.5 Conclusion 27

3 Modèles basés sur les densités de dislocations 29
3.1 Loi d'écoulement 29
3.1.1 Influence de la vitesse de déformation et température 29
3.1.2 Température de transition 30
3.1.3 Du point de vue physique 31
3.1.4 Loi d'écoulement activé thermiquement 32
3.2 Loi d'écrouissage 34
3.2.1 Le modèle de Mecking et Kocks 35
3.2.2 Le modèle de Tabourot 35
3.2.3 Le modèle de Rauch 36
3.2.4 Ecart entre les familles de systèmes {110} et {112} 39
3.3 Loi d'évolution des densités de dislocations 41
3.3.1 Le modèle de Tabourot 41
3.3.2 Le modèle utilisé 42
3.4 Synthèse du modèle de comportement retenu 43
3.4.1 Loi d'écoulement 43
3.4.2 Loi d'écrouissage 43
3.4.3 Loi d'évolution des densités de dislocation 44

4 Influence de l'irradiation neutronique sur le comportement mécanique de l'acier de cuve 47
4.1 Généralités 47
4.2 Processus de création des défauts 47
4.2.1 Emission de neutrons 47
4.2.2 Interactions avec les réseaux cristallins 48
4.2.3 Conséquence sur les réseaux cristallins 48
4.2.4 Migration des défauts 49
4.2.5 Interaction entre défauts d'irradiation et dislocations 51
4.3 Effet de l'irradiation sur les propriétés mécaniques 55
4.3.1 Augmentation de la limite d'élasticité 55

4.3.2 Les courbes contrainte-déformation 56
4.3.3 Augmentation de la température de transition Charpy 57
4.3.4 Diminution de l'énergie de palier ductile 58
4.3.5 Augmentation de la dureté Vickers 58
4.3.6 Diminution de la ténacité 59
4.3.7 Effets du flux et de la dose neutronique 59
4.3.8 Effet dans le domaine des sollicitations cycliques 60
4.3.9 Influence des éléments d'alliage 61
4.3.10 Régénération des caractéristiques mécaniques 61
4.4 Conclusions 62

5 Rupture Fragile 63
5.1 Généralités 63
5.2 Contrainte critique théorique 63
5.3 Lieu de rupture préférentiel 64
5.4 Nucléation 64
5.4.1 Les défauts géométriques 65
5.4.2 Hétérogénéités de déformation 65
5.4.3 Rupture des carbures 66
5.4.4 Mécanisme de Cottrell 67
5.5 Propagation 67
5.5.1 Relaxation par glissement de dislocations 68
5.5.2 Interaction avec les joints de grains 68
5.5.3 Contrainte critique 69
5.6 Approches locales statistiques 69
5.6.1 Modèle de Weibull 69
5.6.2 Modèle de Beremin 70
5.6.3 Distribution de carbure 71
5.7 Effet de différents paramètres sur la rupture fragile 72
5.8 Conclusion 73

II Implémentation et analyse des paramètres 75

6 Implémentation dans ZéBuLoN du modèle de Kock-Rauch 77
6.1 Petites déformations 78
6.1.1 Intégration explicite 78

6.1.2 Intégration implicite 79
6.2 Grandes déformations 80
6.2.1 Notations 80
6.2.2 Intégration explicite 81
6.2.3 Intégration implicite 82
6.3 Tests simples 85
6.3.1 Test sur un point de Gauss 85
6.3.2 Test avec un maillage élémentaire 87
6.4 Conclusion 89

7 Implémentation dans ZéBuLoN du modèle de Tabourot 91
7.1 Description du modèle 91
7.1.1 Loi d'écoulement 91
7.1.2 Cission interne 91
7.1.3 Loi d'évolution de densités de dislocation 92
7.2 Test sur un point de Gauss 92
7.3 Test avec un agrégat simple 94

8 Introduction de l'effet d'irradiation 97
8.1 Introduction 97
8.2 Effet l'irradiation sur la courbe contrainte–déformation 97
8.3 Rappel des équations du modèle 99
8.4 Analyse théorique 100
8.5 Rôle de chaque paramètre sur la courbe contrainte–déformation 100
8.6 Dépendance mutuelle entre les paramètres 103
8.6.1 Calcul d'erreur dans l'espace des paramètres 103
8.6.2 Dépendance entre g_{cb} (g_c/b) et K 103
8.6.3 Dépendance entre g_{cb},K et τ_0 104
8.6.4 Conclusions 106

III Application aux agrégats d'aciers ferritiques 107

9 Identification des paramètres 109
9.1 Données expérimentales de référence 109
9.2 Valeurs des paramètres d'après Libert 110
9.3 Bornes pour les paramètres 110
9.4 Identification préliminaire sur un agrégat simplifié 110
9.5 Identification finale 112

10 Calculs et Résultats **117**

10.1 Agrégat et Conditions limites 117

10.1.1 Choix d'un agrégat polycristallin 117

10.1.2 Détermination des conditions aux limites 118

10.2 Analyse des résultats à l'échelle globale 120

10.2.1 Comportement effectif de l'agrégat 120

10.2.2 Tenseur de contrainte corrigée 122

10.2.3 Analyse des champs locaux à la surface de l'agrégat 122

10.2.4 Distributions de champs complets 126

10.3 Distribution de champs moyennés sur chaque paquet bainitique 131

10.4 Conclusions 135

11 Approche micromécanique locale de la rupture **137**

11.1 Formulation de l'approche 137

11.2 Application de la formulation 139

11.3 Notion de rupture complète par micro-ruptures multiples ("multi-barrières") . . 142

11.4 Conclusion 145

Conclusions et Perspectives **149**

IV Annexe **151**

A Divergence du méthode Newton et explications **153**

A.1 Problème rencontré 153

A.2 Explications 153

A.2.1 Première explication 154

A.2.2 Deuxième explication 155

A.2.3 Un problème commun 156

B Accélération du temps de calcul **157**

B.1 Identification du problème 157

B.2 Sensibilité des variables 157

B.3 Solutions 160

C Triaxilité en déformation plane **163**

C.1 Matériaux orthogonaux 163

C.1.1 Déformation élastique 163

C.1.2 Déformation plastique 164

C.2 Conditions limites et interprétations 164

C.2.1 Conditions limites 164

C.2.2 Interprétation I 165

C.2.3 Interprétation II 165

C.2.4 Interprétation III 165

C.2.5 Résultats supportent les interprétations 166

D **169**

D.1 Cission résolue 170

D.2 Tenseur du Piola-Kirchhoff 171

D.3 Matrice tangente 172

E **175**

E.1 Matrice jacobienne 176

E.1.1 Modèles Kocks-Rauch 176

E.1.2 Modèles Tabourot 179

E.2 Les groupes de paramètres non retenus 185

E.3 Conditions limites de déplacements 187

E.4 Tables 189

E.4.1 Les données pour l'essai de traction du mono cristal 191

Première partie

Bibliographie

Chapitre 1

Acier de cuve et microstructure

Ce chapitre a pour but de fournir une vue générale sur l'acier de cuve, en présentant successivement sa position dans le réacteur, son procédé de fabrication, sa microstructure et son comportement macroscopique.

1.1 Présentation de l'acier de cuve REP

L'acier 16MND5 (équivalent à la nuance ASTM A508 Cl.3), est un acier faiblement allié (Tab. 1.1). Il possède une structure de type bainitique. Il est utilisé pour forger les viroles qui, une fois assemblées, forment la cuve de nombreuses centrales nucléaires européennes.

La figure 1.1 précise la position, l'allure et les composants réalisés en acier 16MND5 dans le Réacteur à Eau Pressurisée.

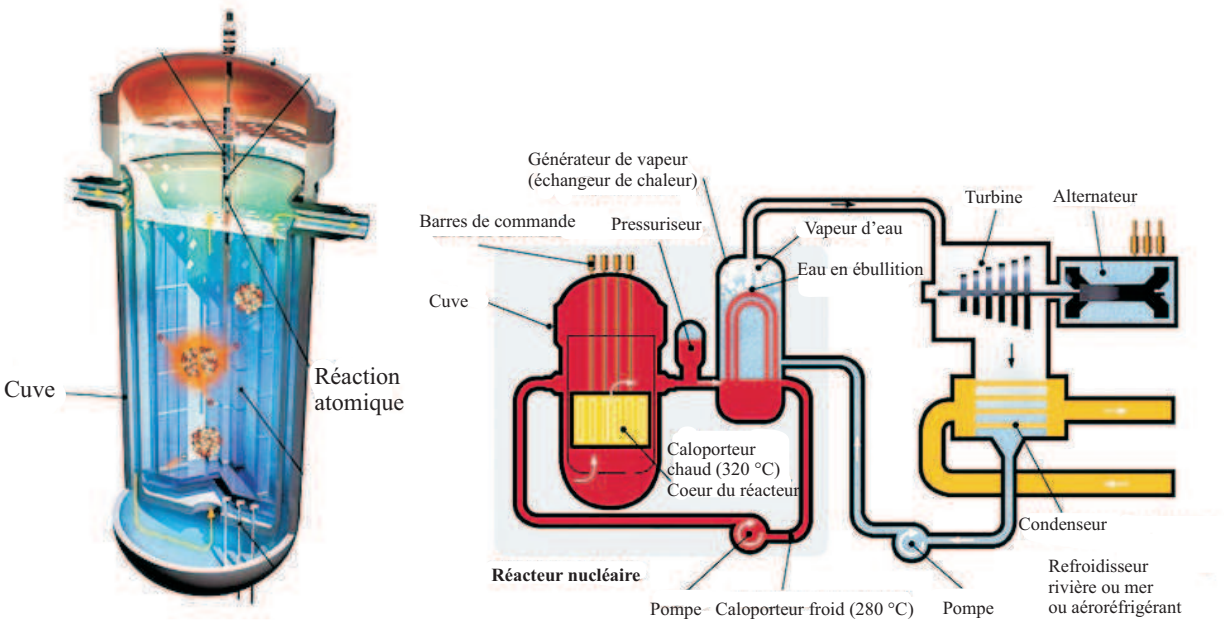


FIG. *1.1. Cuve REP : Composant de la 2ème barrière de sûreté* $(150\,bars, 300°C, 5.10^{19} n/cm^2)$

	C	Mn	P	S	Si	Ni	Cr	Mo	V	Cu	Al	Co
16MND5 forgé		1,15			0,10	0,50		0,43				
-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
soumis à irradiation	0,20	1,60	0,008	0,008	0,30	0,80	0,25	0,57	0,01	0,08	0,04	0,03
16MND5 forgé non		1,15			0,10	0,50		0,43				
-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
soumis à irradiation	0,20	1,60	0,020	0,012	0,30	0,80	0,25	0,57	0,01	0,20	0,04	0,03

TAB. *1.1. Composition chimique relevée sur pièce*

1.2 Formation de bainite à partir d'austénite

1.2.1 Transformation en refroidissement continu (TRC)

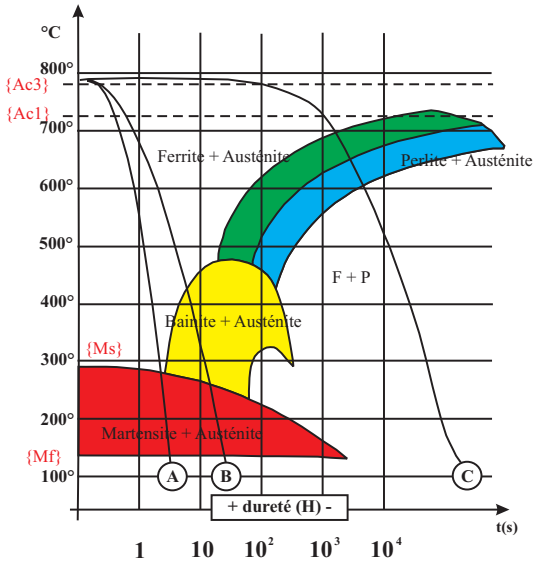


FIG. *1.2. Diagramme TRC*

Les courbes TRC (Fig. 1.2) permettent de décrire les conditions de refroidissement continu qui produisent les différentes microstructures de l'acier et fournissent les duretés associées à trois types de refroidissement : chemins A, B ou C. Les courbes A et B rencontrent la zone martensitique. La courbe B traverse auparavant la zone bainitique. Notre matériau est obtenu par refroidissement selon la courbe B.

1.2.2 Elaboration

L'acier de cuve se présente, à l'état d'équilibre du diagramme de phases, comme un mélange de ferrite et de cémentite. Toutefois le matériau subit une série de traitements thermiques qui modifient sa structure :

- deux austénitisations, d'une durée de 4h40 chacune, à une température comprise entre 865°C et 895°C, suivies chacune d'une trempe à l'eau ;
- un traitement de revenu de 7h30 à une température comprise entre 630°C et 645°C ;
- un traitement de détensionnement des contraintes internes de 8h à 610°C.

Ces traitements permettent d'obtenir une bainite revenue. Lors des refroidissements des deux premiers traitements, la ferrite commence à croître sous forme de lattes depuis les joints des grains austénitiques, voire à l'intérieur des grains depuis un défaut de microstructure : impureté, joint d'un paquet de lattes déjà formé (Fig. 1.4). Le carbone, peu soluble dans la ferrite, va alors précipiter en cémentite entre les lattes, où subsiste par ailleurs un faible taux d'austénite résiduelle. Celle-ci sera transformée pendant le revenu. Le mélange de ferrite et de cémentite forme la bainite.

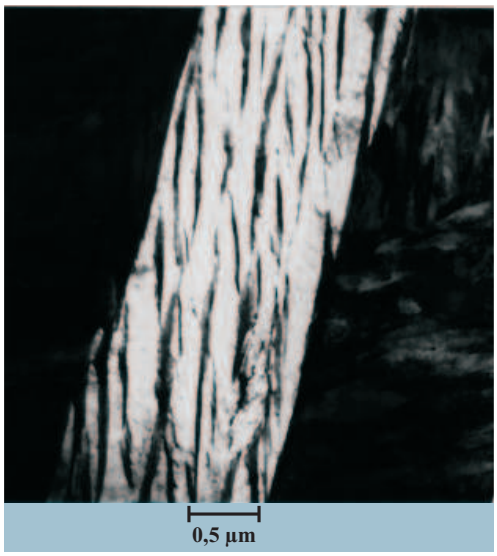


FIG. *1.3. Microstructure de bainite supérieure dans un acier à haute teneur en silicium [Bhadeshia and Edmonds, 1979]*

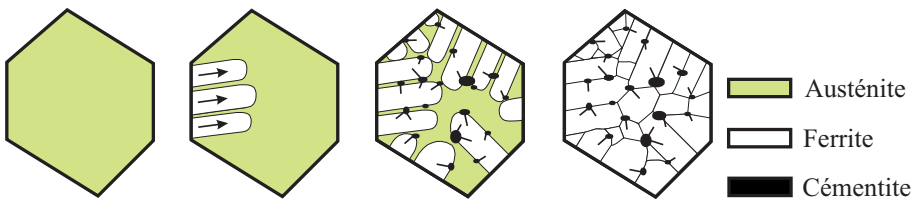


FIG. *1.4. Schéma de la transformation d'austénite en bainite*

1.2.3 Types de bainite

La bainite peut se présenter sous deux formes suivant la température à laquelle elle est formée.

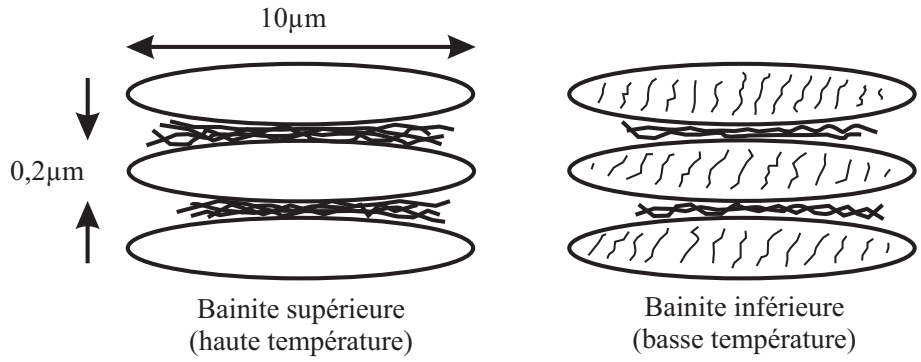


FIG. *1.5. Microstructures de types bainite supérieure et bainite inférieure*

La *bainite supérieure* présente une structure sous forme de fines plaquettes de ferrite d'une épaisseur de 0,2 micromètres et d'une dizaine de micromètres de longueur, qui croissent en paquets appelés lames. Dans chacune de ces lames, les plaquettes sont parallèles et ont la même orientation cristallographique, chacune ayant un plan cristallographique bien défini. Une plaquette d'une lame est souvent appelée sous-unité de bainite. Elles sont séparées par des joints de grain à faible désorientation ou par des particules de cémentite.

La *bainite inférieure* se forme juste au-dessus de Ms. Les lattes sont plus fines et les carbures sont dispersés dans les lattes.

1.3 Les principaux constituants et leur répartition

La microstructure obtenue est donc un mélange de bainite (elle-même constituée de ferrite et de cémentite) et de ferrite. La cémentite est présente aussi bien sur les anciens joints de grains austénitiques qu'entre les lattes de ferrite. Enfin, on observe la présence d'inclusions de sulfure de manganèse (MnS). Dans la suite des travaux, et peut-être par abus de langage, le terme bainite sera plutôt utilisé pour décrire le matériau dans sa globalité, et non pas uniquement la bainite dite supérieure, qui, elle, sera plutôt qualifiée comme une ferrite chargée en cémentite. La communauté scientifique spécialisée étant divisée sur la nature même et sur le processus de formation de la bainite [Takahashi, 2004], il convient de préciser l'emploi du terme "bainite" qui est fait ici pour lever toute ambiguïté.

1.3.1 Les inclusions de sulfure de manganèse (MnS)

Les inclusions présentes dans le matériau (carbures mis à part) sont majoritairement des sulfures de manganèse. Leur formation précède l'étape de mise en forme par forgeage. C'est bien évidemment la forte teneur en manganèse (utilisé notamment pour améliorer la trempabilité de l'acier et pour durcir la phase ferritique) qui favorise l'apparition de ces inclusions. Tanguy [Tanguy, 2001] montre qu'ils sont majoritairement purs, mais qu'on peut en trouver contenant des noyaux d'oxydes divers. Il est intéressant de noter [Hausild, 2002] que ces particules restent

les dernières traces de l'étape de mise en forme : si les traitements thermiques font disparaître toute trace d'anisotropie au sein des autres constituants, la forme allongée de certains MnS qui est due à leur déformation en cours de forgeage subsiste (Fig. 1.7). Les inclusions de sulfure de manganèse ont une forme ellipsoïdale parfois très allongée dans la direction de fibrage (notée L comme montré en figure 1.6). Leur dimension dans la direction L est généralement comprise entre 5 et 50 μm, alors qu'elle est plutôt limitée à la dizaine de micromètres dans les directions T et S.

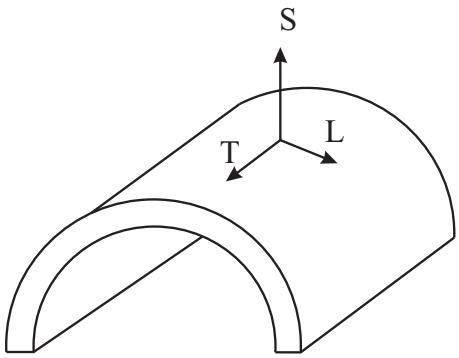


FIG. *1.6. Repérage des directions par rapport à la géométrie de mise en forme de la cuve*

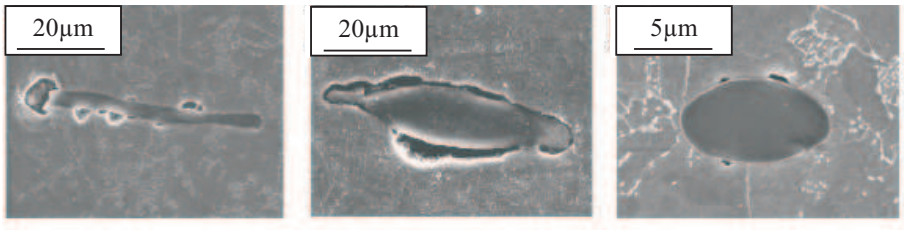


FIG. *1.7. Différentes inclusions de sulfure de manganèse [Pesci, 2004]*

La fraction volumique de ce constituant peut être déterminée par la technique d'analyse d'images [Hausild, 2002], (ce qui permet de déterminer une fraction f_v de l'ordre de 10^{-3}) ou par l'utilisation de la formule de Franklin [Renevey, 1998] :

$$f_v = 0,054\left(\%S - \frac{0,001}{\%Mn}\right) + 0,05\%O = 5,7.10^{-4} \tag{1.1}$$

où les pourcentages sont exprimés en masse. Ces deux résultats sont donc relativement cohérents. De nombreux travaux ont été menés afin d'étudier l'influence de cette phase sur la rupture fragile ou ductile de l'acier 16MND5. Plusieurs travaux [Renevey, 1998], [Carassou, 1999] ont notamment pris en compte leur présence dans une modélisation de la rupture par approche locale. Les observations expérimentales de rupture fragile à froid permettent aussi de tirer des conclusions quant à leur rôle de déclencheur de la rupture. Leur rupture prématurée induit un phénomène de concentration de contrainte au sein de la microstructure qui facilite l'amorçage du clivage [Pesci, 2004], [Hausild, 2002]. Dans le cadre de cette thèse, nous ne prendrons pas en compte de façon explicite la présence du MnS.

1.3.2 La cémentite (Fe3C)

La cémentite est le deuxième principal constituant du matériau. Sa répartition n'est pas du tout homogène. L'apparition de carbures de compositions différentes de celle de la cémentite est possible (carbures ε). Leur composition est Fe_xC avec x compris entre 2,3 et 3. La cémentite inter-granulaire est finalement la dernière trace directement observable des anciens joints de grains austénitiques. Ces carbures atteignent des tailles supérieures aux carbures se formant au sein de la ferrite [Carassou, 1999] (Fig. 1.8). Le joint de grains est l'un des sites privilégiés de leur germination et de leur croissance (environ 1 μm contre 100 nm). Les carbures précipités au sein des paquets de ferrite (intra-granulaires) ont une forme sphéroïdale ou d'aiguilles (Fig. 1.9). Ces carbures forment des îlots à l'intérieur des lattes de ferrite. Ils ne sont donc pas du tout répartis de manière homogène (Fig. 1.10, 1.11) [Hausild, 2002], [Pesci, 2004].

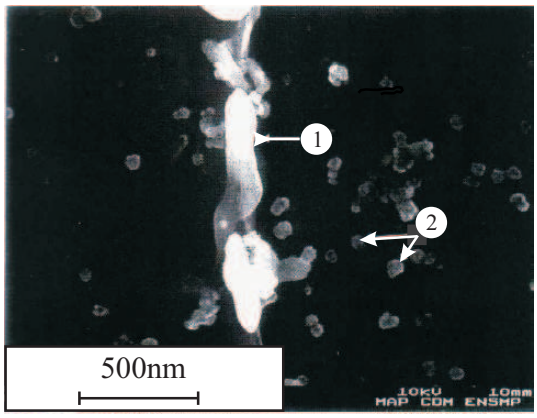


FIG. 1.8. *Carbures observés au MEB, aux anciens joints austénitiques (1) et dans la ferrite (2) [Carassou, 1999]*

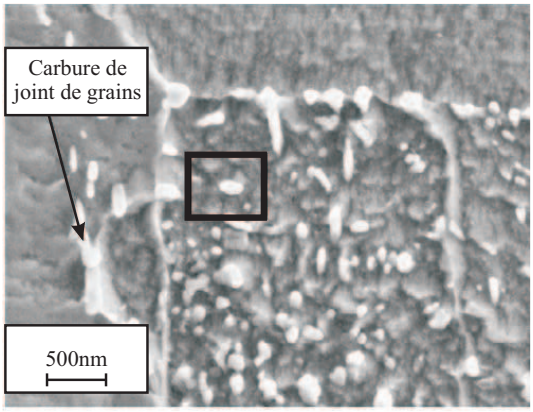


FIG. 1.9. *Carbures situés dans la ferrite observée au MEB-FEG (Field Emission Gun) d'EDF (Site des Renardières).*

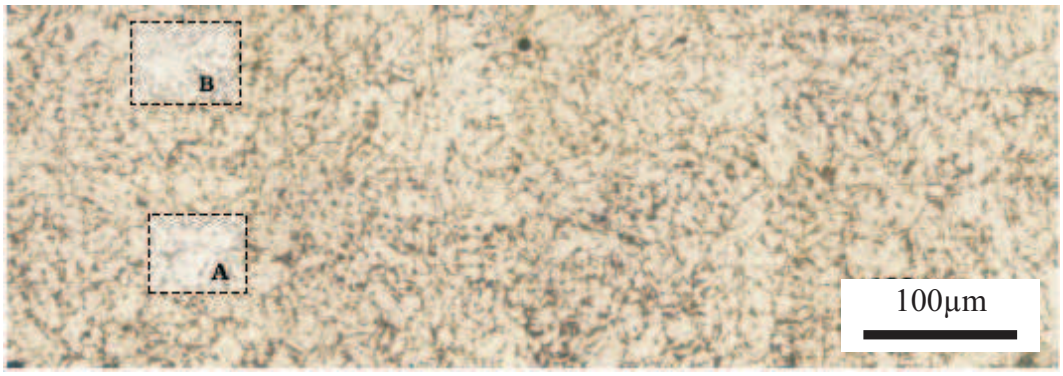


FIG. 1.10. *Observation optique en plan large de la microstructure de l'acier 16MND5, après attaque au nital à 2%*

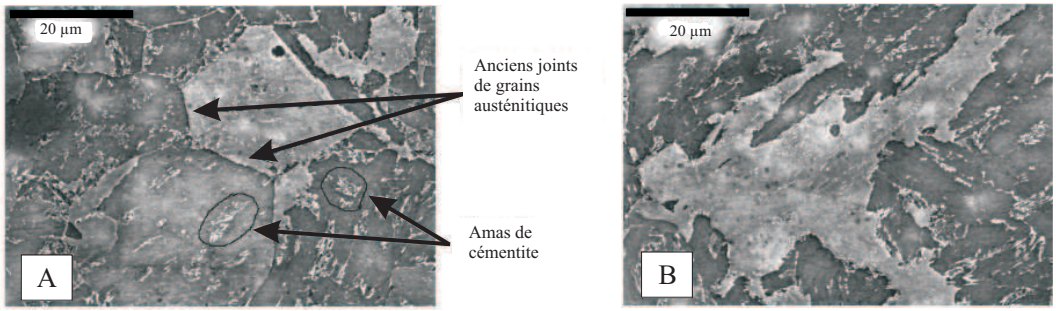


FIG. 1.11. *Observation au Microscope Electronique à Balayage (MEB) de détails de la microstructure de l'acier 16MND5. Les deux zones A et B sont les mêmes que celles des observations reportées en figures 1.10*

1.3.3 La matrice ferrite

Une revue détaillée de la cristallographie de microstructures bainitiques proches de l'acier 16MND5 est disponible dans les travaux de thèse de Lambert [Lambert-Perlade, 2001]. Lors de la croissance des lattes de ferrite, les relations d'orientation entre la ferrite (α) formée et l'ancien grain austénitique (γ) sont décrites par les théories de Kurdjumov-Sachs (K-S) ou de Nishiyama-Wassermann (N-W), qui sont rappelées par les relations [Kelly, 1992] :

$$\begin{cases} (111)_\gamma \parallel (101)_\alpha \\ \left([1\bar{1}0]_\gamma : [11\bar{1}]_\alpha\right) = \eta \\ \left([1\bar{2}0]_\gamma : [10\bar{1}]_\alpha\right) = 5,25 - \eta \\ \left[\begin{array}{l} \eta = 0° (\text{relationKS}) \\ \eta = 5,26° (\text{relationNW}) \end{array}\right. \end{cases} \tag{1.2}$$

Ainsi l'orientation d'une latte de ferrite est en partie déterminée par l'orientation du grain austénitique à partir duquel elle croît : un plan dense austénitique sera parallèle à un plan dense de la ferrite formée, et une direction dense de la ferrite sera de la même façon parallèle à une direction dense de l'austénite. Gourgues *et al* [Gourgues et al., 2000] établissent ainsi un

histogramme théorique des angles de désorientation entre les paquets ferritiques provenant d'un même grain austénitique. En comparant cet histogramme à la distribution obtenue par Hausild [Hausild, 2002] sur les lattes d'un ancien grain austénitique, on peut constater que ces relations décrivent bien ce que l'on observe expérimentalement (Fig. 1.12). Il semble difficile de distinguer les anciens joints de grains austénitiques des joints formés entre les paquets de lattes de ferrite du point de vue de la désorientation. Seule la présence de carbures de taille plus importante permet de distinguer facilement les anciens joints austénitiques. Lors de l'apparition des différentes variants ferritiques, ceux-ci croissent sous forme d'entités communément définies comme des lattes. Ces lattes forment des paquets de même orientation. L'observation correcte de ces lattes passe par l'utilisation d'un Microscope Electronique à Transmission (MET) (Fig. 1.13), éventuellement d'un microscope MEB-FEG [Morris et al., 2003], [Karlik et al., 2003], [Obrtlik et al., 2006].

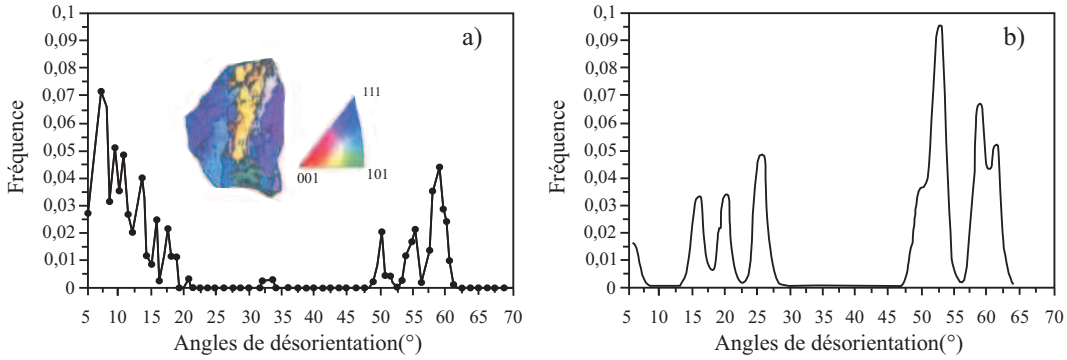
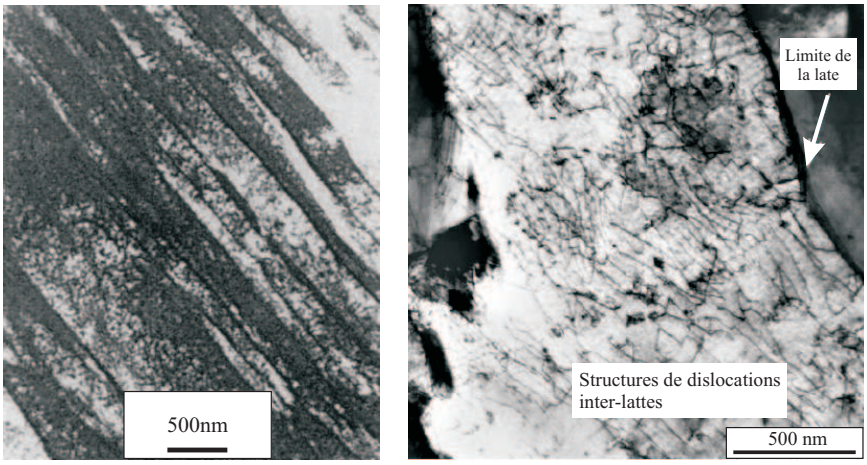


FIG. *1.12. Comparaison entre : a) la distribution expérimentale des désorientations entre les lattes d'un ancien grain austénitique [Hausild, 2002] et b) la distribution théorique prédite grâce aux relations K-S [Gourgues et al., 2000].*



a) *b)*

FIG. *1.13. Vue des lattes formant les paquets ferritiques. a) Observation d'un ensemble de lattes dans un acier ferritique [Morris et al., 2003], b) observation de la structure de dislocation à l'intérieur d'une latte pour l'acier 16MND5 [Karlik et al., 2003]*

1.4 Texture cristallographique

L'acier ne présente pas de texture cristallographique marquée, ce qui s'explique par les traitements qu'il subit : l'austénitisation lui confère une structure équi-axiale et une texture cristallographique isotrope. Cette isotropie de texture n'est pas perturbée mais exacerbée par la croissance des nombreux variants de ferrite. Une représentation de la texture déduite d'une cartographie EBSD étendue ($750 \times 600 \mu m^2$), le confirme (Fig. 1.14).

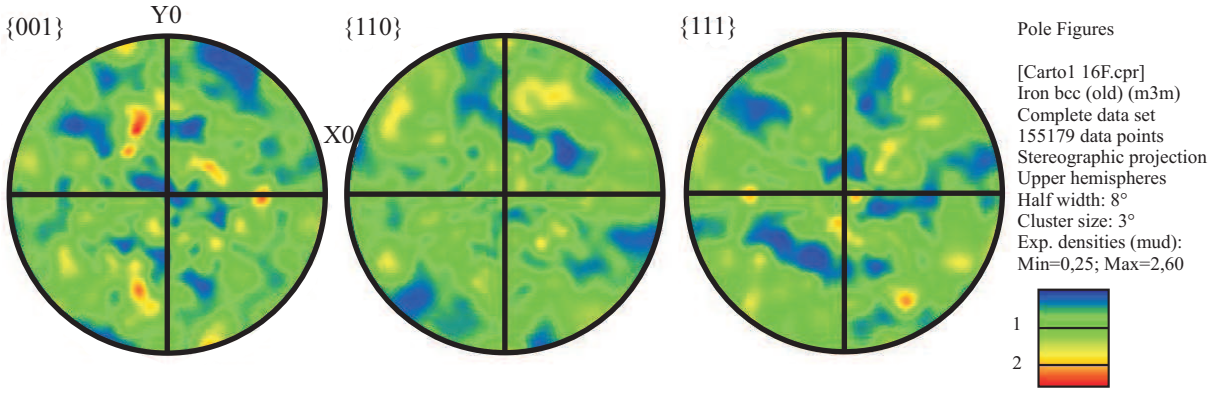


FIG. *1.14. Texture cristallographique déduite en post-traitement d'une cartographie EBSD de l'acier 16MND5 [Mathieu, 2006b]*

1.5 Représentation synthétique de la microstructure

La figure 1.15 présente une synthèse de ces observations

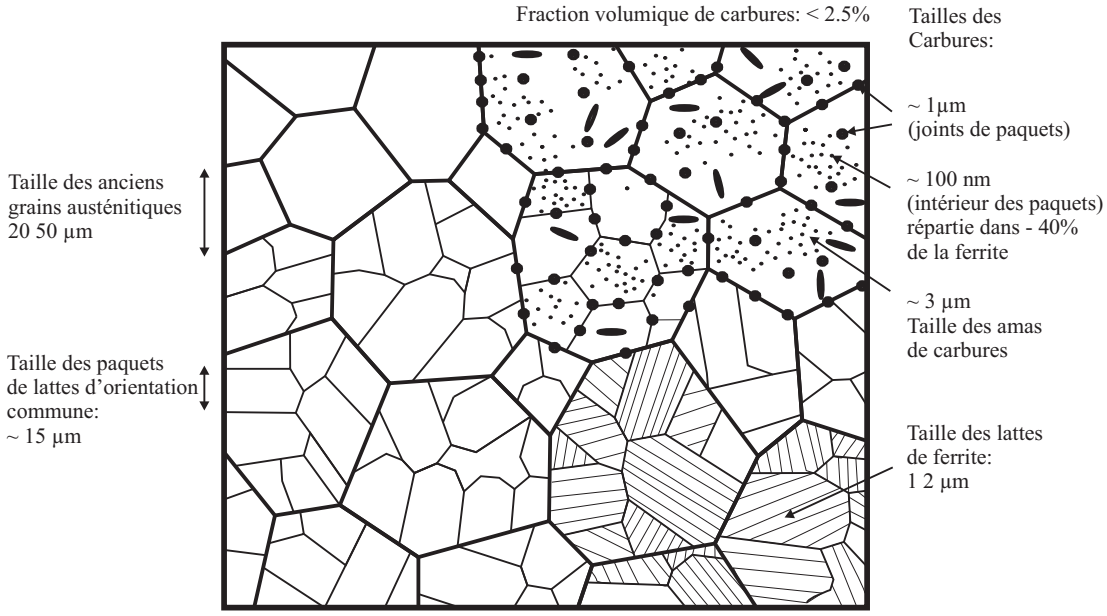


FIG. *1.15. Représentation synthétique des dimensions caractéristiques de la microstructure [Mathieu, 2006b]*

1.6 Comportement macroscopique

1.6.1 Traction quasi-statique

Reveney [Renevey, 1998] fournit dans sa thèse des courbes de traction idéalisées. En effet, les courbes de traction à basse températures de l'acier 16MND5 présentent lors de l'entrée en plasticité un palier en contrainte, le palier de Lüders, pendant lequel se produisent de nombreux déclenchements l'instabilité plastiques. On représente fréquemment ce palier en fournissant simplement la valeur moyenne de la contrainte. C'est ce qui a été fait (Fig. 1.16).

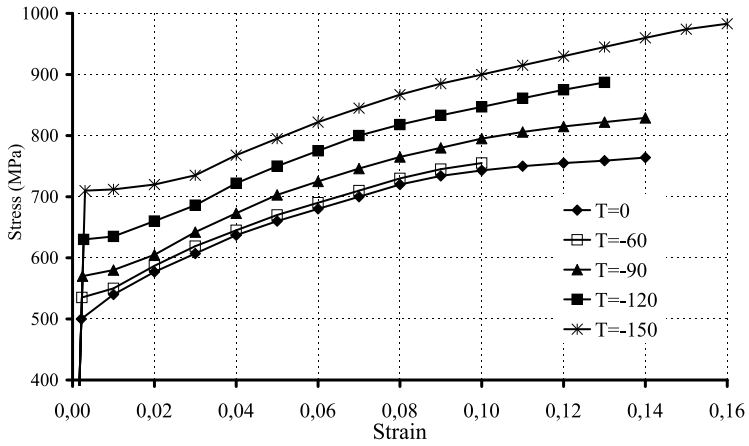


FIG. *1.16. Essais de traction uniaxiale (sens T de la figure 1.6) à différentes températures sur le matériau BQ12 [Renevey, 1998]. Les perturbations présentes en début de plasticité, dues aux instabilités de déformation, ont été éliminées*

On observe une forte augmentation de la limite d'élasticité en fonction de la température pour les températures inférieures à 0°C. Cette forte dépendance à la température s'amenuise pour les températures positives [Tanguy, 2001]. Il y a une légère saturation de l'écrouissage pour les forts niveaux de déformation.

1.6.2 Compression

Les essais de compression menés par Tanguy [Tanguy, 2001] à température ambiante sur un acier similaire (quoique issu d'une cuve différente), permettent, en première approximation, d'admettre que le comportement est symétrique, au moins pour ce qui concerne la limite d'élasticité (Fig. 1.17). Une augmentation de l'écrouissage en compression est observée, mais il n'en sera pas tenu compte. Les conditions d'essais de natures différentes ne permettent pas de tirer de conclusions à ce sujet.

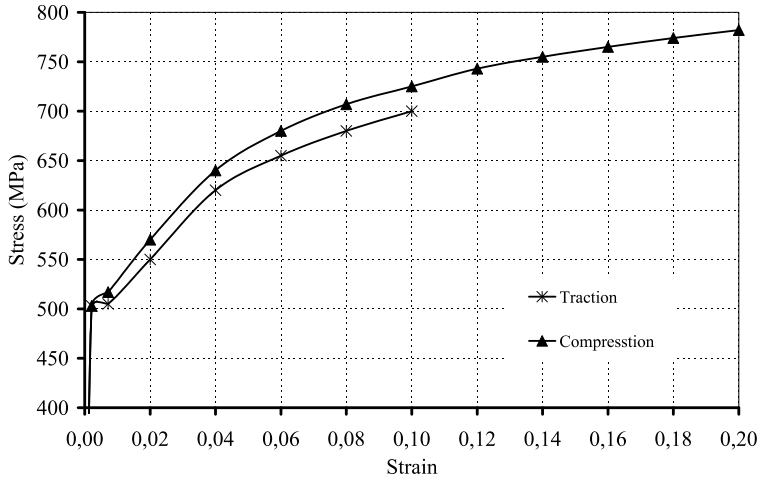


FIG. *1.17. Essais de traction et de compression uniaxiales (sens T) à la température ambiante réalisée sur une nuance proche du matériau étudié [Tanguy, 2001].*

1.6.3 Conclusion

Notre matériau possède une structure complexe à l'échelle microscopique. Il est constitué par des lattes, des paquets des lattes et des grains avec les formes très différentes. De plus, dans la matrice de ferrite, il y a des inclusions de cémentites, Cu, MnS, Ni, Zn répartis de manière hétérogène.

Chapitre 2

Dislocations et plasticité cristalline

L'apparition et le développement des dislocations sont des éléments fondamentaux pour construire les lois des modèles polycristallins. Donc, avant de considérer en détail les lois du modèle dans le chapitre suivant, nous voulons effectuer ici un bref rappel concernant les différents types de dislocations et leur comportement.

2.1 Les types de dislocation et leurs mouvements

2.1.1 Dislocations : un glissement localisé

Partons du constat qu'une déformation plastique s'obtient par glissement de plans cristallins. Ce glissement ne peut pas se faire d'un seul coup : il faudrait que tous les atomes concernés par le plan de glissement (soit environs 10^{14} par mm^2, soit 100 000 milliards) se soulèvent en même temps (Fig. 2.1). L'énergie, la force qu'il faudrait est bien supérieure à ce qui a est mesurée.

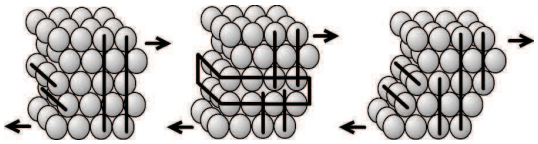


FIG. *2.1. Impossibilité d'un glissement global du plan cristallin [Chan, 2007]*

Le mouvement cristallin se propage d'une zone à l'autre du cristal. L'endroit où se produit de façon instatnténée la déformation est une perturbation de petite taille, comparé au plan cristallin total : la schématisation retient un modèle dans lequel une seule rangée atomique bouge à la fois (Fig. 2.2). La perturbation associée est appellée dislocation ; c'est un glissement localisé.

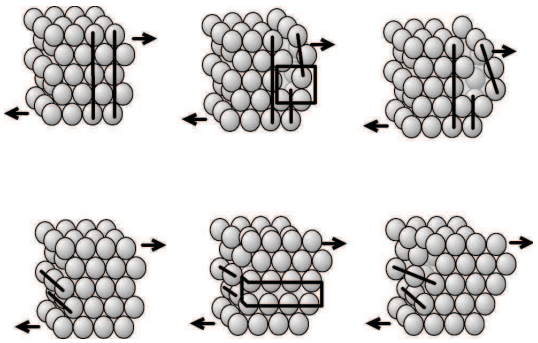


FIG. *2.2. Propagation de la déformation par une dislocation, deux mécanismes modèles [Chan, 2007]*

2.1.2 Dislocation coin

Le premier modèle présenté ci-dessus, que l'on appelle dislocation coin (edge dislocation), peut être décrit de la manière suivante : on enlève un demi-plan atomique (vertical sur le dessin), les autres plans se maintiennent donc pour "combler le vide". La zone de perturbation (Fig. 2.3), ou cœur de la dislocation, est donc une zone dont le diamètre vaut quelques distances interatomiques ; cette dimension (environ un millionième de millimètre) est très petite devant celle de l'objet. Les atomes n'étant pas à leur place, la perturbation génère une déformation élastique autour de la dislocation, donc une certaine énergie élastique.

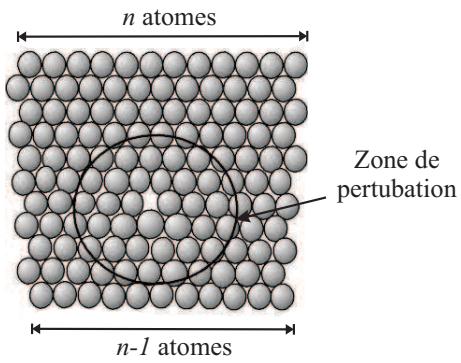


FIG. *2.3. Arrangement des atomes au niveau du cœur d'une dislocation [Chan, 2007]*

Le cristal se déforme sur toute sa largeur, donc le défaut s'étend lui aussi sur toute la largeur. La dislocation forme donc une ligne : autour de cette ligne, l'arrangement des atomes est perturbé, mais loin de cette ligne, l'arrangement des atomes redevient normal (Fig. 2.4).

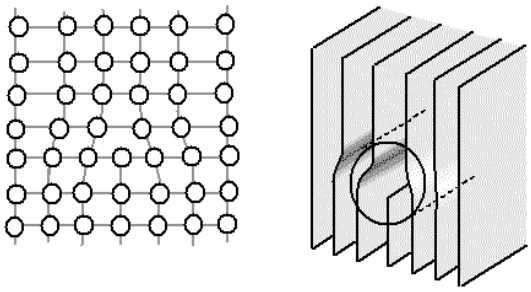


FIG. *2.4. La dislocation : une perturbation linéaire de l'arrangement des atomes [Chan, 2007]*

Ainsi, lorsque cette ligne se déplace à travers le cristal, elle propage la déformation. Après son passage, le cristal a exactement la même structure qu'avant, il y a seulement une marche qui s'est créée à la surface de départ de la dislocation. Lorsque la dislocation a traversé de part en part le cristal, celui-ci présente une marche de chaque côté, il a été cisaillé de manière irréversible, mais sa structure cristalline est intacte.

2.1.3 Dislocation vis

Le deuxième modèle de déformation présenté (Fig. 2.5b) est la dislocation dites "vis" (screw dislocation) : elle se propage perpendiculairement à la déformation, à la manière d'une fermeture glissière (*éclair*). Elle porte ce nom car, si on fait le tour de la dislocation en suivant un plan atomique, on monte d'un niveau par tour, à la manière du filet d'une vis (Fig. 2.5a).

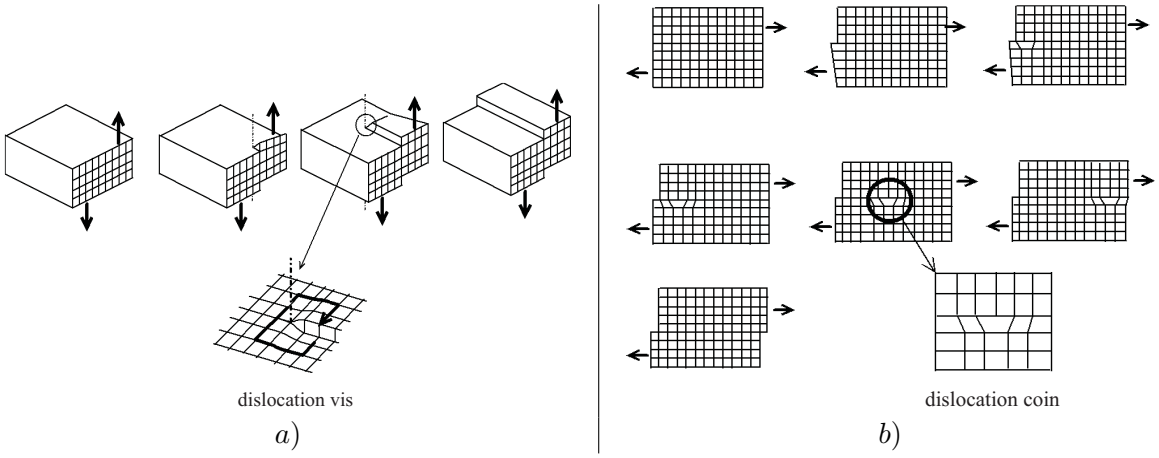


FIG. 2.5. *a) Cisaillement irréversible du cristal lors du passage de la dislocation coin. b) Dislocation vis : une autre perturbation linéaire de l'arrangement des atomes, propageant la déformation [Chan, 2007]*

La déformation propagée est la même dans le cas d'une dislocation vis ou coin, mais c'est le mouvement de la ligne qui change : dans la direction de la déformation dans le cas d'une dislocation coin (Fig. 2.5b), perpendiculairement à la déformation dans le cas d'une dislocation vis (Fig. 2.5a).

2.1.4 Dislocation mixte

Nous avons décrit ici deux types de dislocation rectiligne, qui sont deux modèles extrêmes ; dans la réalité, les lignes de dislocations sont courbes, et une dislocation est donc parfois coin lorsque la ligne est perpendiculaire à la déformation, parfois vis lorsque la ligne est parallèle à la déformation, parfois entre les deux. On peut même avoir une boucle de dislocation (la ligne est un cercle fermé).

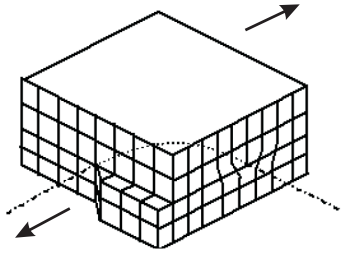


FIG. 2.6. *Dislocation mixte : la ligne de la dislocation est courbe, la dislocation est ici vis à l'extrémité gauche et coin à l'extrémité droite [Chan, 2007]*

2.2 Multiplication

Multiplication des dislocations par le mécanisme de Franck et Read

Les dislocations se multiplient au cours de la déformation plastique. Le principal mécanisme fut décrit par Franck et Read (Fig. 2.7) :

- une dislocation est épinglée à ses extrémités ;
- la liaison est trop forte pour qu'elle puisse se libérer, donc la dislocation se propage en se tordant ;
- lorsque deux portions de la dislocation se rejoignent, la dislocation se sépare en deux : une boucle de dislocation qui génère la déformation, et un segment linéaire qui va pouvoir recommencer le mécanisme.

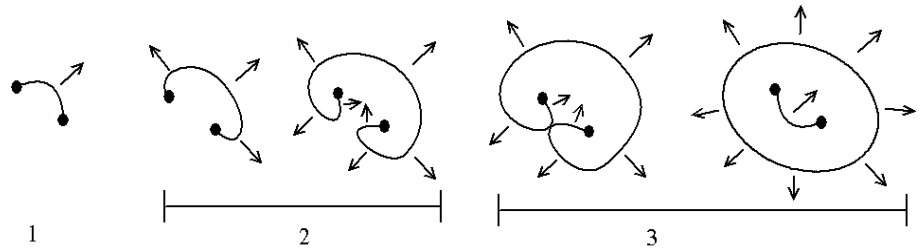


FIG. *2.7. Illustration de la multiplication des dislocations par le mécanisme de Franck et Read [Chan, 2007]*

2.3 Interaction

2.3.1 Interaction avec le réseau

Le réseau cristallin étant périodique, il y a des positions où la dislocation a une énergie élastique plus importante que d'autres. Le déplacement de la dislocation nécessite de vaincre ces "barrières énergétiques" ; on a donc un phénomène similaire au frottement. Cette force de frottement induite est appelée "force de Peierls-Nabarro". De fait, lorsqu'un métal subit une déformation plastique, il s'échauffe.

2.3.2 Interaction avec des défauts ponctuels

La dislocation est une zone de perturbation. Donc, en raison du désordre ambiant, un atome étranger, une impureté, peut s'y réfugier sans trop perturber le reste du cristal ; autrement dit, l'énergie de l'atome étranger est plus faible si celui-ci se trouve au niveau de la dislocation que s'il est au cœur du cristal. Cette diminution d'énergie constitue une "énergie de liaison" entre l'impureté et la dislocation. On a donc deux phénomènes :

- si les atomes étrangers ont tendance à migrer vers la dislocation, on parle de ségrégation. Les atomes entourant la dislocation forment ce que l'on appelle un nuage (ou atmosphère) de Cottrel ;
- si une dislocation est liée à un des atomes étrangers (qu'ils aient ségrégé vers elle ou bien qu'elle les ait rencontrés lors de son mouvement), elle aura du mal à s'en détacher, elle sera épinglée.

Le modèle du nuage de Cottrel, proposé en 1949 par Cottrel et Bilby, a été enfin "vu" par microscopie à effet de champ (*field emission microscope*) en 2000. Ceci explique trois phénomènes :

- un métal pur est plus ductile qu'un métal contenant des additifs, le fer pur est plus ductile que les aciers ferritiques qui contiennent du carbone (puisqu'il n'y a pas d'épinglage) ;
- les dislocations épinglées sont freinées au démarrage, ce qui explique la diminution de la contrainte au début de la déformation plastique dans les métaux non purs ("décrochement") ;
- l'effet Portevin-Le Chatelier : dans certaines conditions, notamment de température et de vitesse de déformation, la dislocation se décroche de son nuage de Cottrell, mais les atomes diffusent suffisamment vite pour rattraper la dislocation et l'épingler à nouveau. On observe donc des oscillations sur la courbe de traction, c'est l'effet Portevin-Lechatelier (Fig. 2.8 et 2.9).

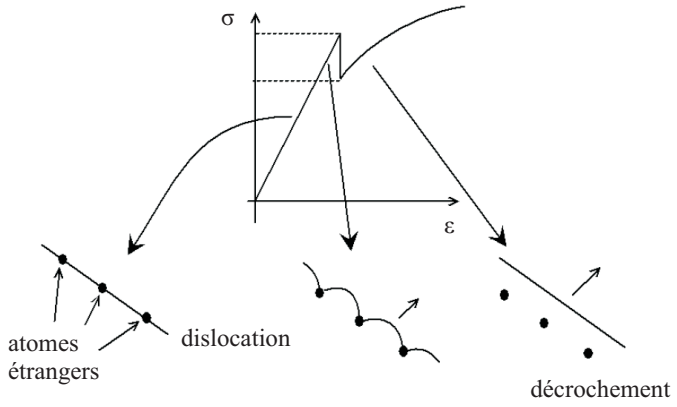


FIG. *2.8. Dislocation épinglée par des atomes étrangers [Chan, 2007]*

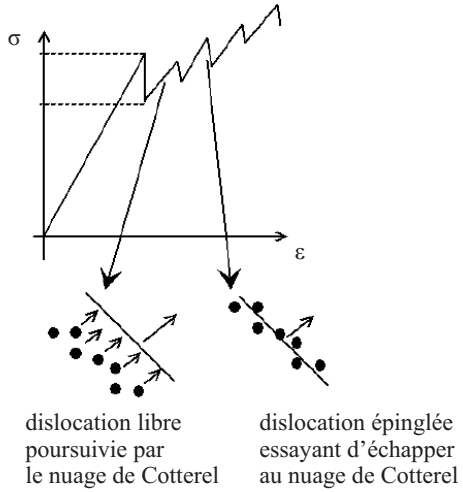


FIG. *2.9. "Course-poursuite" entre la dislocation en mouvement (déformation plastique) et le nuage de Cottrell (diffusion) [Chan, 2007]*

2.3.3 Interaction avec des autres dislocations

Le comportement collectif des dislocations est particulièrement important. Imaginons que deux dislocations créant un cisaillement de direction opposée se rencontrent. Chose étonnante, les dislocations disparaissent, un peu comme les bosses et les creux des vagues se compensent (Fig. 2.10).

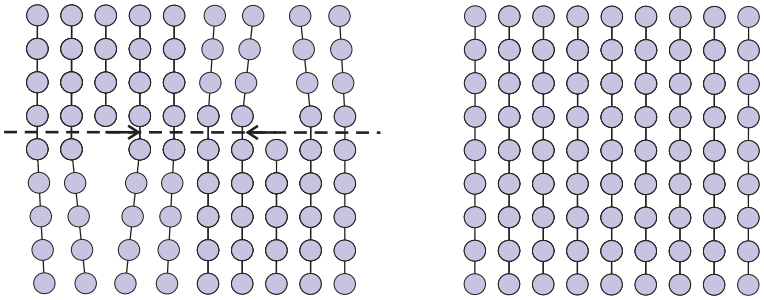


FIG. *2.10. Deux dislocations créant un cisaillement de direction opposée se rencontrent [Chan, 2007]*

De manière générale, les dislocations peuvent s'attirer ou se repousser, comme des aimants, selon l'intensité et la direction du cisaillement qu'elles possèdent. Il arrive qu'en se rencontrant elles forment des réactions pour former une nouvelle dislocation.

Deux dislocations, dont les lignes ne sont pas parallèles, et qui se croisent vont s'épingler mutuellement. Il s'agit là encore d'un effet de la déformation élastique :

- soit les déformations s'annulent, il y a donc à l'intersection une diminution de l'énergie élastique, donc une "liaison" entre les dislocations ;
- soit les déformations s'ajoutent, il y a donc à l'intersection une augmentation de l'énergie élastique, donc les dislocations se repoussent et rechignent à se croiser.

Plus il y a de dislocations, plus leur mouvement est difficile. Or, comme les dislocations se multiplient pendant la déformation plastique, on comprend bien que plus un matériau a été déformé plastiquement, plus les dislocations auront du mal à bouger. C'est à cela qu'est dû l'écrouissage, l'augmentation de la limite élastique lors de la déformation plastique.

2.3.4 Interaction avec précipité

Un cristal peut contenir des précipités, c'est-à-dire une autre phase noyée au sein du cristal (par exemple dans une fonte, des carbures de fer Fe_3C dans la matrice de fer). Les précipités vont eux aussi freiner la dislocation ; par contre, ils ne se déplacent pas, donc c'est nécessairement la dislocation qui va leur rencontre. La présence de précipités durcit donc le matériau, c'est ce que l'on appelle le durcissement structural.

Il y a deux mécanismes de freinage de la dislocation. L'un ou l'autre est actif en fonction de considérations énergétiques. Le premier est le mécanisme d'Orowan (Fig. 2.11), qui touche les précipités les plus gros. Le rayon de courbure n'étant pas très important, la dislocation peut facilement se courber et contourner le précipité. Lorsque la dislocation a franchi le précipité, les deux lignes se rejoignent, cela libère la dislocation et forme une boucle autour du précipité.

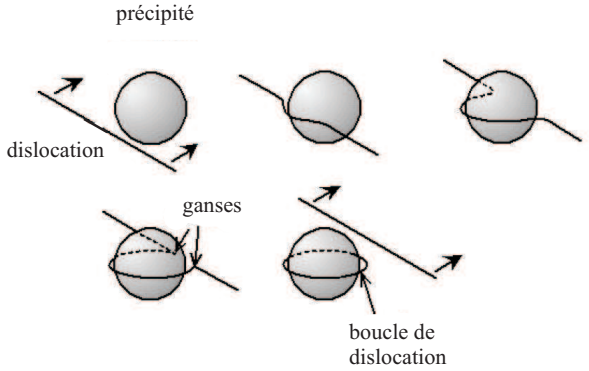


FIG. *2.11. Durcissement structural par le mécanisme d'Orowan : la dislocation contourne le précipité et forme une boucle de dislocation autour de lui [Chan, 2007]*

Le deuxième mécanisme est le cisaillement du précipité (Fig. 2.12). On le trouve lorsque l'énergie créée par le passage au travers du précipité est faible (compatibilité de la structure cristalline, faible énergie associée au défaut).

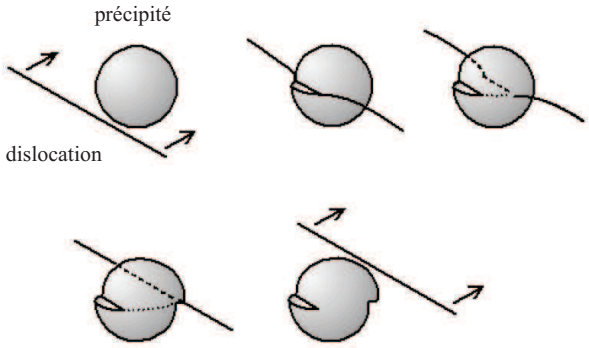


FIG. *2.12. Durcissement structural produit par le cisaillement du précipité [Chan, 2007]*

2.3.5 Conclusion

Les mécanismes liés à la plasticité cristalline sont complexes dans les matériaux réels, et ne limitent pas à un simple glissement. Comprendre chaque comportement spécifique reste une question ouverte. Dans la suite, nous utiliserons des lois moyennes, représentant le comportement collectif des dislocations.

Chapitre 3

Modèles basés sur les densités de dislocations

Dans ce chapitre, on présente la formulation des modèles basés sur les principaux aspects microstructuraux qui caractérisent l'acier 16MND5.

3.1 Loi d'écoulement

L'écoulement plastique des aciers ferritiques est sensible à la température ainsi qu'à la vitesse de déformation. Cette sensibilité vient de la mobilité des dislocations, qui dépend fortement de la température. En raison de cela, la loi d'écoulement est basée sur la théorie du mouvement thermiquement activé des dislocations.

3.1.1 Influence de la vitesse de déformation et température

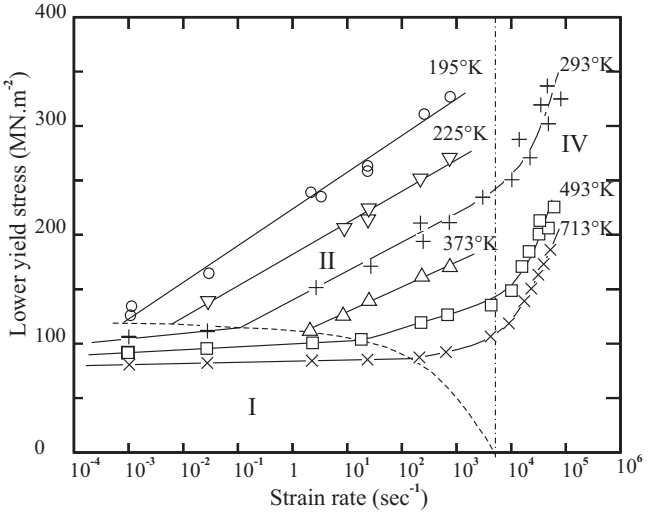


FIG. *3.1. Influence de la vitesse de déformation sur la limite d'écoulement en cisaillement dans le cas d'un acier plat au carbone (C=0,12 poids%) [Campbell and Ferguson, 1970]*

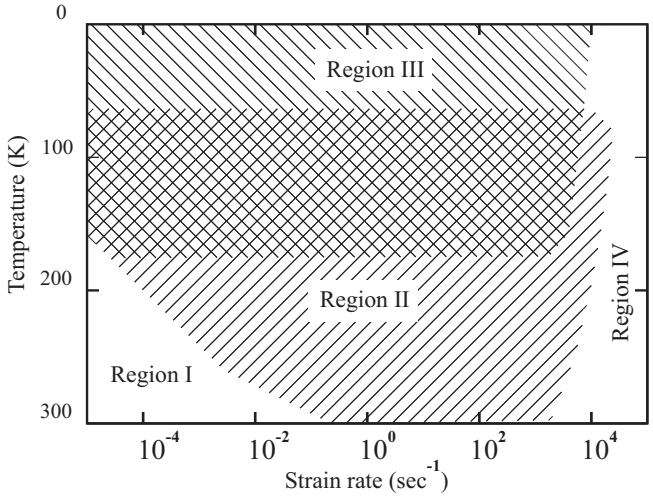


FIG. *3.2. Domaines température/vitesse reflétant les différents mécanismes de déformation pour un acier bas carbone [Rosenfield and Hahn, 1966]*

Les aciers ont une sensibilité marquée à la vitesse de déformation [Rosenfield and Hahn, 1966], [Campbell and Ferguson, 1970], [Harding, 1977]. La limite d'écoulement est dépendante de la vitesse de déformation et de la température (Fig. 3.1). Comme indiqué sur la figure 3.2, le comportement des aciers fait intervenir quatre mécanismes de déformation distincts : une région appelée *athermique* (I) où le matériau est très peu sensible à la vitesse de déformation pour l'ensemble des températures considérées ; une région appelée *thermiquement activée* (II) très sensible à la vitesse de déformation et à la température et une région où ont lieu des phénomènes de drainage visqueux *phonon drag* (IV) où la sensibilité est plus forte. La région (III) correspond à une déformation par maclage. Les modèles que nous allons décrire représentent les mécanismes des régions (I) et (II).

3.1.2 Température de transition

Le fer-α, à la base des aciers ferritiques comme les aciers doux et les aciers Dual-Phase, présente deux types de comportement suivant la température. Ceux-ci sont communs aux métaux de structure CC tels que le molybdène ou le niobium. Au-dessous d'une température dite de transition T_T, située entre 200 K et 240 K pour le fer [Louchet et al., 1979] et proche de l'ambiante pour les aciers doux [Lan et al., 1992], la limite d'élasticité dépend fortement de la température et varie d'environ $10^{-2}\mu$ à 0 K à $10^{-4}\mu$ à la transition (μ est le module de cisaillement en élasticité isotrope). Au-delà de T_T, la limite d'élasticité ne varie quasiment plus en fonction de la température et ceci jusqu'à une température proche de $T_F/3$ où T_F est la température de fusion [Christian, 1983] : le comportement se rapproche de celui des métaux de structure CFC. Au dessus de $T_F/3$, se produit une chute de la limite d'élasticité due à des processus d'auto-diffusion et de restauration.

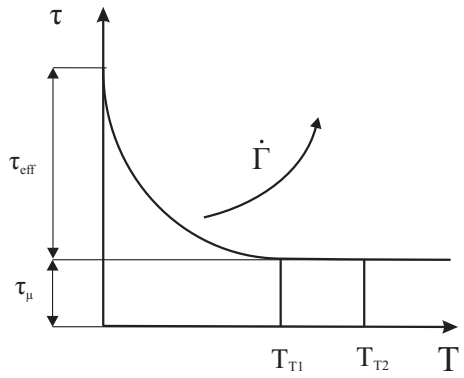


FIG. 3.3. *Evolution de la contrainte d'écoulement en fonction de la vitesse de déformation et de la température dans le domaine des basses températures (d'après Conrad [Conrad, 1964])*

D'après Conrad [Conrad, 1964], lorsque la vitesse de déformation croît, la température de transition T_T augmente également de T_{T1} à T_{T2} (Fig.3.3). La cission résolue qui provoque l'écoulement, τ se compose de deux termes :

$$\tau = \tau_\mu + \tau_{eff}(\dot{\Gamma}, T) \tag{3.1}$$

où τ_μ est la contrainte athermique correspondant au plateau présent au-delà de la température de transition T_T et τ_{eff} est la contrainte effective due aux processus thermiquement activés responsables de la sensibilité à la température et à la vitesse de déformation au-dessous de T_T.

3.1.3 Du point de vue physique

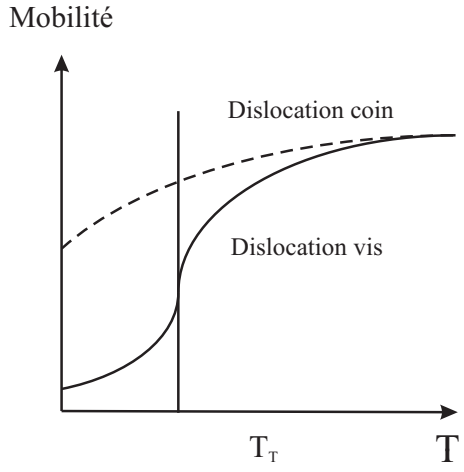


FIG. 3.4. *Mobilités des dislocations de type vis et non vis en fonction de la température*

L'explication physique de ces deux types de comportement de part et d'autre de T_T vient de la mobilité des dislocations vis qui est différente dans ces deux régimes. Ces résultats ont été observés lors d'essais de traction in situ (par microscope électronique en transmission) sur le fer-α, le niobium et le molybdène [Louchet et al., 1979]. En effet, la mobilité des dislocations vis

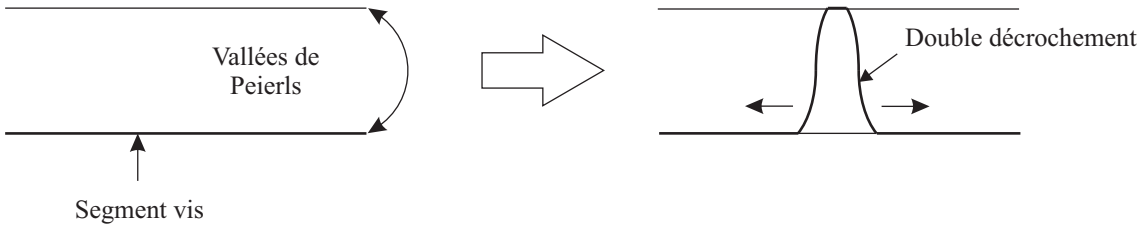


FIG. *3.5. Formation de doubles décrochements dans la structure CC*

dans la structure cubique centrée est beaucoup plus faible que celle des dislocations coins (Fig. 3.4). Alors que la mobilité des segments coins reste quasi-constante en fonction de la température, la mobilité des dislocations vis augmente rapidement aux basses températures pour atteindre celle des dislocations coins au-delà de la température de transition.

La réponse mécanique des monocristaux de fer-α à basse température est gouvernée par le comportement des dislocations vis. Les dislocations mixtes ou coins glissent sous faibles contraintes à basse température et laissent derrière elles de longs dipôles vis de vecteur de Burgers $\underline{\mathbf{a}}/2 < 111 >$. Ceux-ci ont une structure de cœur étendue en trois dimensions qui est à l'origine de la forte friction de réseau des métaux cubiques centrés. Ce processus peut être décrit en introduisant un potentiel périodique sinusoïdal dont les creux correspondent aux vallées et les maxima aux pics de Peierls. Sous l'effet d'une contrainte appliquée, le franchissement de ces pics a lieu par la formation de doubles décrochements (Fig. 3.5). Ce mécanisme est thermiquement activé.

3.1.4 Loi d'écoulement activé thermiquement

Dans les métaux de structure CC et en dessous de la température de transition de comportement plastique, la plasticité est en effet gouvernée par le franchissement des vallées de Peierls par le mécanisme de double décrochement, qui est lui-même activé thermiquement. La fréquence υ de formation d'un double décrochement de longueur caractéristique l_c le long d'un segment vis de longueur L (Fig. 3.6) est donnée par la théorie de l'activation thermique :

$$\upsilon = \upsilon_D \frac{b}{l_c} \frac{L}{l_c} \exp\left(-\frac{\Delta G(\tau_{eff})}{k_b.T}\right) \tag{3.2}$$

où
k_b est la constante de Boltzman ;
b est le module du vecteur de Burgers ;
υ_D est la fréquence de Debye ;
L est la longueur du segment de dislocation vis ;
l_c est la longueur critique pour la formation d'un double décrochement.
Le terme $\Delta G(\tau_{eff})$ désigne l'énergie d'activation du double décrochement, qui correspond à la hauteur de la barrière énergétique constituée par les vallées de Peierls. Cette énergie dépend de la cission effective τ_{eff}, définie comme étant la cission appliquée à laquelle on retranche sa composante athermique τ_μ :

$$\tau_{eff} = \tau - \tau_\mu \tag{3.3}$$

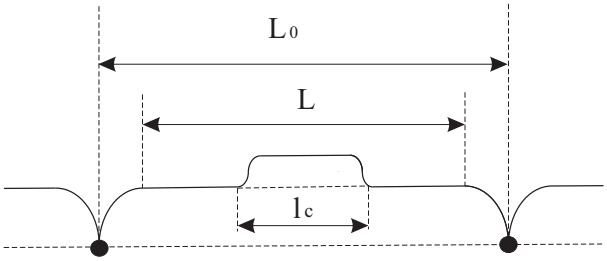


FIG. 3.6. *Ancrage d'une dislocation sur des obstacles* ($T < T_T$)

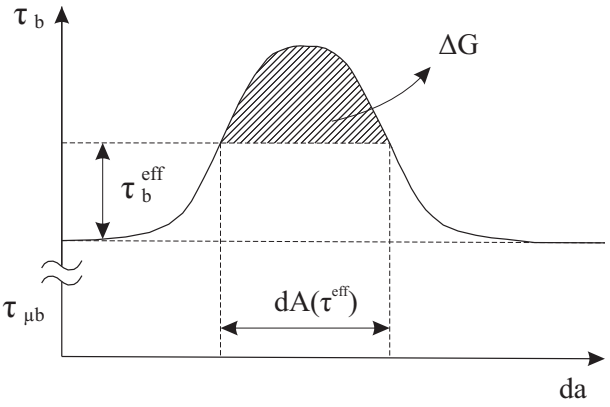


FIG. 3.7. *Activation thermique/profil de l'obstacle*

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

$$v_s = vb = v_D \frac{b^2 L}{l_c^2} \exp\left(-\frac{\Delta G(\tau_{eff})}{k.T}\right) \tag{3.4}$$

En utilisant l'expression d'Orowan

$$\dot{\gamma} = \rho_m b \overline{v} \tag{3.5}$$

dans laquelle
ρ_m est la densité de dislocations mobiles ;
b est le module du vecteur de Burgers ;
$\overline{v}$ est la vitesse moyenne des dislocations vis,

on trouve la vitesse de glissement $\dot{\gamma}$:

$$\dot{\gamma} = \rho_m v_D \frac{b^3 L}{l_c^2} \exp\left(-\frac{\Delta G(\tau_{eff})}{k.T}\right) \tag{3.6}$$

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

par rapport à la scission effective :

$$V^* = -\frac{\partial \Delta G}{\partial \tau_{eff}}\bigg|_{\underset{\sim}{\xi},T} \tag{3.7}$$

L'expression de l'énergie d'activation devient naturellement :

$$\Delta G\left(\tau_{eff}\right) = \Delta G_0 - V^* \tau_{eff} \tag{3.8}$$

Le volume d'activation ainsi défini peut quant à lui dépendre de la température et de la contrainte effective. Certains auteurs ont proposé des expressions plus explicites de V^* en fonction de τ_{eff}. Ainsi, si l'on considère un segment vis soumis à une cission effective, l'énergie de formation vaut :

$$\Delta G \approx \Delta G_0 - \tau_{eff} b l_c l_p \tag{3.9}$$

où ΔG_0 correspond à l'énergie de formation d'un double décrochement sans l'apport de l'activation thermique, l_c à la longueur critique pour la formation d'un double décrochement et l_p à la distance séparant deux vallées de Peierls. Cela revient à reprendre l'expression de l'équation (3.8) avec un volume d'activation uniquement fonction des caractéristiques du mécanisme élémentaire de double décrochement, et par conséquent indépendant de T :

$$V^* = b l_c l_p \tag{3.10}$$

Kocks *et al*[Kocks et al., 1975], propose une description plus phénoménologique pour définir l'évolution de ΔG en fonction de τ_{eff}.

$$\Delta G\left(\tau^s_{eff}\right) = \Delta G_0 \left(1 - \left(\frac{\left|\tau^s_{eff}\right|}{\tau_R}\right)^p\right)^q \tag{3.11}$$

Cette formulation implique une dépendance du volume d'activation V^* en température. Le terme correspond à l'énergie d'activation à contrainte effective nulle, c'est-à-dire sans apport de l'activation thermique, tandis que τ_R désigne la valeur de la friction de réseau, c'est-à-dire la cission à fournir pour franchir à coup sûr une vallée de Peierls (avec ou sans apport de l'activation thermique). Les paramètres p et q sont quant à eux reliés au profil des obstacles, ou autrement dit à la profondeur des vallées de Peierls. Nous avons donc préféré utiliser la formule de Kocks dans la loi d'écoulement :

$$\dot{\gamma}^s_t = \dot{\gamma}_0 \exp\left[-\frac{\Delta G_0}{k_B T}\left(1 - \left(\frac{|\tau^s_{eff}\left(\Delta \underset{\sim}{\xi}^e_t\right)|}{\tau_R}\right)^p\right)^q\right] sign\left(\tau^s\right) \tag{3.12}$$

3.2 Loi d'écrouissage

Il existe deux principaux types d'approches dans la modélisation de l'écrouissage du fer-α : les modèles basés sur le glissement plastique d'une part, et les modèles intégrant la densité de dislocations comme variables internes d'autre part.

Les modèles phénoménologiques qui considèrent le glissement plastique comme variable critique sont presque tous basés sur la théorie de la micro-plasticité de Taylor. Cette théorie a

été la première à relier l'incrément de cission critique nécessaire pour activer le glissement sur un système (s) au glissement cumulé sur tous les systèmes. La vitesse de variation de cission critique $\dot{\tau}_c^s$ s'écrit :

$$\dot{\tau}_c^s = \sum_u h^{su} \dot{\gamma}^u \tag{3.13}$$

Dans une première approche, les termes de la matrice d'écrouissage h^{su} restent constants au cours de la déformation. On peut trouver dans la littérature des modèles différents, qui sont basés sur celui de Taylor mais ils introduisent des formulations de h^{su} différentes : modèle de Peirce, Asaro et Needleman [Peirce et al., 1983], modèle de Kalidindi [Kalidindi, 2001], modèle de Kocks [Kocks et al., 1975]. D'autres approches [Cailletaud, 1992], transposent à l'échelle microscopique les modèles usuels d'écrouissage en macro-plasticité, ce qui les rend plus performantes d'un point de vue phénoménologique, en particulier pour la description des chargements cycliques ou non proportionnels.

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

3.2.1 Le modèle de Mecking et Kocks

Ce modèle [Mecking and Kocks, 1981] est l'un des premiers à avoir introduit une densité de dislocations comme variables d'écrouissage. Il utilise la relation empirique liant la densité de dislocations totale ρ et la contrainte d'écoulement σ , qui est du type :

$$\sigma = \sigma_0 + M.\alpha.\mu.b\sqrt{\rho} \tag{3.14}$$

avec :
σ_0, une constante prenant en compte la friction de réseau (forces de Peierls) ;
M le facteur de Taylor moyen ;
α un paramètre matériau variant de 0,1 et 0,5 suivant le type d'interaction entre dislocations ;
μ le module de cisaillement ;
b la norme du vecteur de Burgers.

3.2.2 Le modèle de Tabourot

Ce modèle [Tabourot, 1992] repose sur les hypothèses du modèle de Kocks. La différence provient de l'introduction des densités de dislocations et des cissions critiques sur chacun des systèmes de glissement.

La cission critique d'activation sur un système donné dépend de la densité de dislocations sur chacun des systèmes de glissement. Elle dépend donc du système considéré. La cission critique τ_c^s s'écrit :

$$\tau_c^s = \tau_c^s + \mu b \sqrt{\sum_u a^{su} \rho^u} \tag{3.15}$$

La matrice a^{su}, introduite par Franciosi [Franciosi, 1984], définit l'interaction entre les différentes familles de systèmes de glissement (s) et (u).

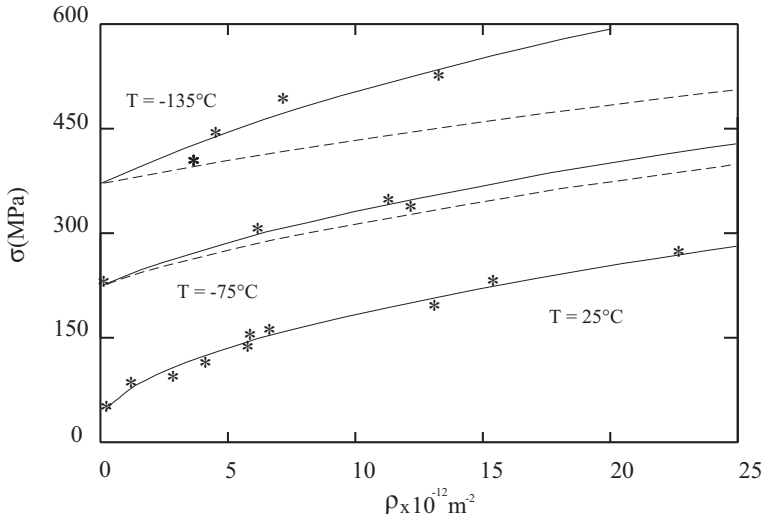


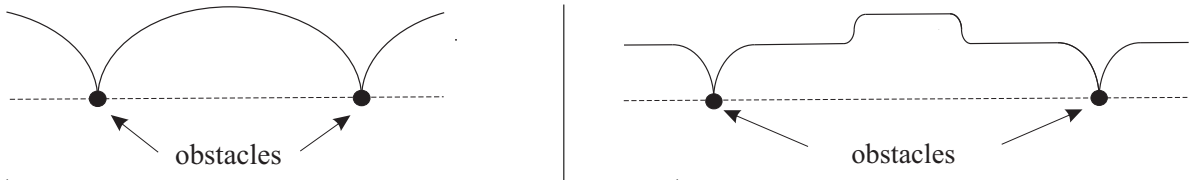
FIG. *3.8. Relation entre la cission résolue et la densité de dislocations totale. Résultats expérimentaux (symboles *) de Keh et Weissmann [Keh, 1965] pour le fer pur (cisaillement simple)*

3.2.3 Le modèle de Rauch

La relation 3.15 associant la contrainte d'écoulement à la racine carrée de la densité de dislocations est justifiée dans le cas des métaux de structure CFC, notamment du fait du mécanisme d'écrouissage de type forêt. S'il est acquis que cette relation s'applique aux métaux CC à température ambiante, il a été montré (Fig. 3.8) qu'elle ne s'applique plus en dessous de la température de transition de comportement T_a (température athermique) (Fig. 3.9). Le modèle de Rauch [Rauch, 1993] propose une expression de la contrainte interne basée sur les mécanismes spécifiques au comportement des matériaux CC à basse température.

3.2.3.1 Calcul de la contrainte interne

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



a)T > Ta : plasticité contrôlée par les interactions de type forêt

b)T < Ta : plasticité contrôlée par la mobilité des dislocations vis

FIG. *3.9. Spécificités du comportement plastique à basse température dans les CC*

La contrainte requise pour plastifier le matériau doit permettre de générer des doubles décrochements *via* la contrainte τ_{eff} et vaincre la contrainte interne τ_{inter} due aux arbres de la forêt :

$$\tau = \tau_{eff} + \tau_i \tag{3.16}$$

L'expression de la contrainte interne peut s'obtenir par un bilan énergétique : sous l'effet de la contrainte effective τ_{eff}, un double décrochement de longueur initiale l_c peut se propager à l'ensemble d'un segment vis de longueur L. La contrainte interne qui en résulte correspond à l'augmentation d'énergie stockée dW_s dans le matériau du fait de l'accroissement de la longueur totale du brin dL lors de la propagation du segment vis.

$$dW_s = \tau_i d\gamma \tag{3.17}$$

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

$$\tau_i = \frac{dW_i}{d\gamma} = \frac{\mu b^2 dL}{b dA} \tag{3.18}$$

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

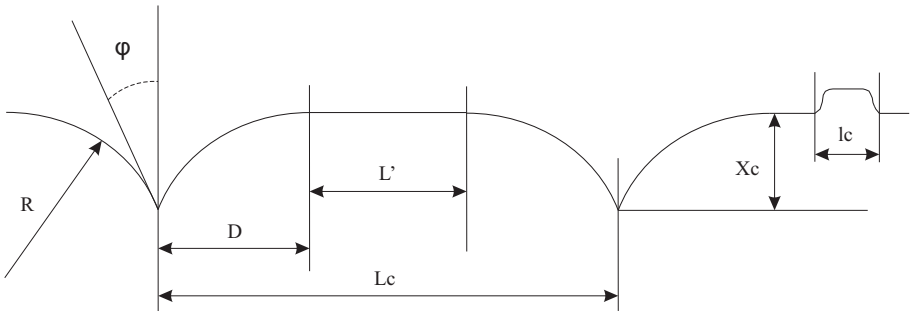


FIG. *3.10. Ancrage d'une dislocation mobile sur les arbres de la forêt*

Rauch a démontré, en raisonnant à partir de la figure 3.10, que le terme $\frac{dL}{dA}$ peut s'écrire :

$$\frac{dL}{dA} = \frac{\beta}{L_0} \tag{3.19}$$

où L_0 correspond à la distance moyenne entre les points d'ancrage et β à un facteur de proportionnalité essentiellement lié à la résistance des obstacles :

$$\beta = \frac{2\cos\varphi}{1+\sin\varphi}\left(1 + \frac{\tau_i}{\tau}\sin\varphi\right) \tag{3.20}$$

Pour obtenir une dépendance entre τ_i et la densité de dislocations ρ, il faut expliciter la distance entre obstacles L_0. D'après Louchet [Louchet et al., 1979], le brin de dislocation franchit l'obstacle dès qu'il a parcouru une distance critique x_c et l'aire balayée par la dislocation pour se défaire de l'obstacle correspond donc à l'aire associée à un obstacle :

$$L_0 x_c = \frac{1}{\rho} \tag{3.21}$$

Ici, ρ désigne en principe la densité de dislocations de type forêt. La distance x_c peut être exprimée à partir de la figure 3.10, si on considère que la partie mixte reliant le point de désancrage à la dislocation vis forme un arc de cercle de rayon $R = \frac{\mu b}{\tau}$. R est lié à x_c et à l'angle de courbure critique ϕ que le segment mixte dessine lors du désancrage de l'obstacle :

$$x_c = R\,(1 - \sin\varphi) \tag{3.22}$$

Finalement, si les constantes β, R, ϕ sont regroupées dans un même terme α , on obtient la relation :

$$\tau_i = \frac{(\alpha\mu b)^2\,\rho}{\tau} \quad avec \quad \alpha{=}\sqrt{\beta\,(1 - \sin\varphi)} \tag{3.23}$$

Il est important de noter que cette constante α, essentiellement liée à la résistance des obstacles, dépend de la température, tout comme β et ϕ. La contrainte appliquée se déduit aisément des équations 3.16, 3.23 :

$$\tau = \frac{\tau_{eff}}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{\tau_{eff}^2 + 4\,(\alpha\mu b)^2\,\rho} \tag{3.24}$$

Cette équation permet de discerner deux cas extrêmes :

– Aux températures élevées ($T > Ta$), l'activation thermique joue un rôle moins important et un développement limité de l'expression 3.24 en $\frac{\tau_{eff}}{\tau}$au premier ordre conduit à :

$$\tau = \tau_{eff} + \alpha\mu b\sqrt{\rho} \qquad \frac{\tau_{eff}}{\tau} << 1 \tag{3.25}$$

– Aux faibles températures ($T << Ta$), l'activation thermique devient prépondérante et un développement de l'expression 3.24 en $\frac{\tau_{eff}}{\tau}$ au premier ordre donne :

$$\tau = \tau_{eff} + \frac{(\alpha\mu b)^2\,\rho}{\tau_{eff}} \qquad \frac{\tau_{\mathrm{i}}}{\tau} << 1 \tag{3.26}$$

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

3.2.3.2 Application à l'acier

Toutes les équations de ce modèle s'appliquent aux métaux purs pour lesquels la limite d'élasticité dépend de la friction de réseau. L'ajout d'éléments d'alliage peut augmenter la friction de réseau et modifier la résistance des obstacles (arbres de la forêt). Cela tend à réduire à la fois la mobilité des segments vis et mixtes. Ce surcroît de contrainte dû aux éléments d'alliages dépend du caractère de la dislocation. C'est ainsi que l'on distingue τ_0^v et τ_0^m , désignant respectivement le surcroît de contrainte sur les segments vis et mixtes. L'équation 3.8 devient alors :

$$\tau_i = \tau - (\tau_{eff} + \tau_0^v) = \frac{(\alpha\mu b)^2}{\tau - \tau_0^m} \tag{3.27}$$

Selon Rauch, le taux d'écrouissage étant généralement plus faible que dans un métal pur, τ_0^v est en principe plus grand que τ_0^m. Dans le cadre d'une description simplifiée de l'écrouissage,

Rauch se propose de ne considérer qu'un seul terme de friction , ce qui conduit à remplacer τ par $\tau - \tau_0$ dans les équations (3.16) et (3.24) :

$$\tau = \tau_0 + \frac{\tau_{eff}}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{\tau_{eff}^2 + 4\left(\alpha\mu b\right)^2 \rho} \tag{3.28}$$

Cette expression est à comparer avec la formulation simple de la loi d'écrouissage dérivée des modèles utilisés pour les matériaux de structure CC. L'intérêt majeur de la loi d'écrouissage proposée ici réside dans la possibilité d'étendre l'identification à un large domaine de températures.

3.2.4 Ecart entre les familles de systèmes {110} et {112}

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

La nature de ces mécanismes étant encore mal comprise, l'écart entre les familles de systèmes $\{110\}$ et $\{112\}$ est identifié sur les résultats expérimentaux obtenus sur le fer pur (Fig.3.11) [Keh, 1965], [Keh, 1967]. L'écart entre les familles de systèmes est porté par le terme τ_0 qui est supposé constant pour les systèmes $< 111 > \{110\}$ et linéairement dépendant de la température pour les systèmes $< 111 > \{112\}$:

$$\tau_0^{\{110\}} = \tau_0 \tag{3.29}$$

$$\tau_0^{\{112moyen\}} = \frac{\tau_0^{\{112f\}} + \tau_0^{\{112d\}}}{2} = \tau_0 + f(T) \tag{3.30}$$

Il est à noter que le phénomène d'asymétrie du glissement n'est pas pris en compte dans notre modèle : la scission exercée sur les systèmes $\{112\}$ est calculée comme étant la moyenne de la cission dans le sens de glissement dit "facile" et le sens "difficile". La fonction écart $f(T)$ entre les cissions critiques des deux familles de systèmes de glissement est représentée sur la figure 3.12 en s'appuyant sur les données expérimentales de la figure 3.11 : en dessous d'une valeur critique de température T_c, l'écart est identiquement nul.

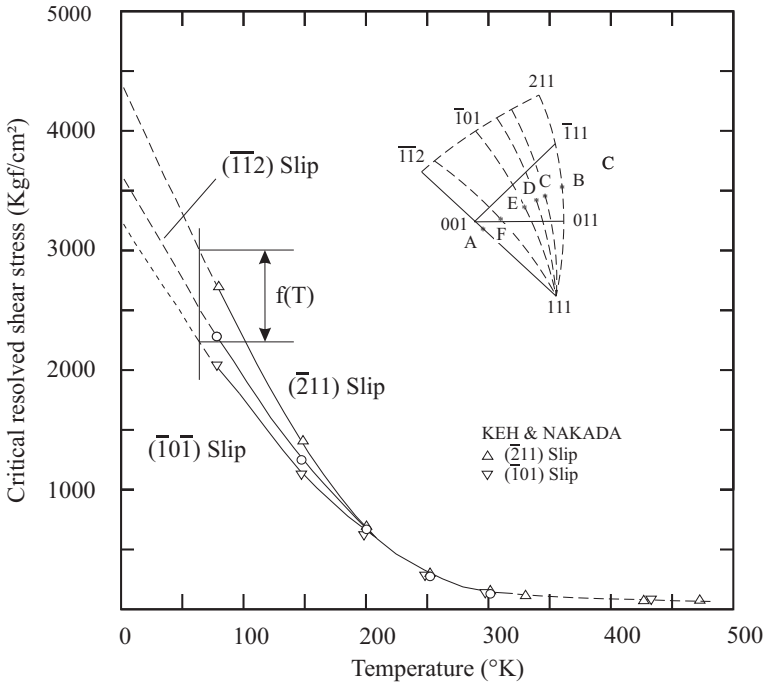


FIG. *3.11. Evolution de la cission résolue critique d'activation des systèmes de glissement* $< 111 > \{110\}$ *et* $< 111 > \{112\}$ *dans le Fer-*α *, d'après [Keh, 1965]. Représentation de l'écart* $f(T)$ *entre les deux familles de systèmes.*

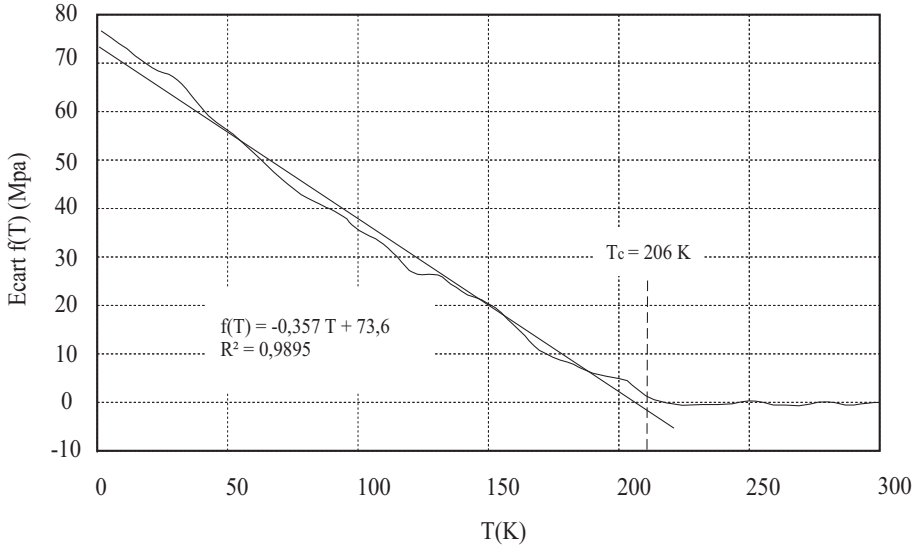


FIG. *3.12. Identification de l'écart* $f(T)$ *entre les familles de systèmes par une fonction linéaire de* T

3.3 Loi d'évolution des densités de dislocations

Plusieurs mécanismes sont susceptibles de créer ou d'annihiler des dislocations : production de dislocations par double glissement dévié, production de dislocations par sources de Frank Read, annihilation de dislocations de vecteur de Burgers opposés. La loi d'évolution des densités de dislocation peut s'écrire par découplage entre l'évolution des densités de dislocation sur le système considéré et les systèmes latents, [Stainier et al., 2002]. Comme présenté précédemment, le mouvement des dislocations est fortement influencé par les dislocations de type forêt, nous préférons coupler l'évolution de la densité de dislocations sur un système avec la densité d'obstacles, et donc à la densité de dislocations sur tous les autres systèmes.

3.3.1 Le modèle de Tabourot

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

$$\rho^s = \rho^s_m + \rho^s_i \tag{3.31}$$

On considère que les dislocations immobiles prédominent :

$$\rho^s_i >> \rho^s_m \tag{3.32}$$

L'équation différentielle décrivant d'évolution de la densité de dislocations mobiles fait intervenir trois contributions : la production r^s_p, l'annihilation r^s_{ma} et l'immobilisation r^s_i des dislocations :

$$\dot{\rho}^s_m = r^s_p - r^s_{ma} - r^s_i \tag{3.33}$$

L'évolution de la densité de dislocations immobiles est quant à elle gouvernée par l'immobilisation des dislocations mobiles r^s_i , ainsi que par l'annihilation des dislocations immobiles r^s_{ia} :

$$\dot{\rho}^s_i = r^s_i - r^s_{ia} \quad \text{avec : } r^s_i = \frac{\rho^s_m |\underline{v}^s|}{\Lambda^s} \tag{3.34}$$

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

$$\Lambda^s = \frac{K}{\sqrt{\sum_{u \neq s} \rho^u}} \tag{3.35}$$

Il est possible de simplifier l'expression en utilisant l'équation d'Orowan :

$$|\dot{\gamma}^s| = \rho^s_m b \, |\underline{v}^s| \tag{3.36}$$

D'où :

$$r^s_i = \frac{|\dot{\gamma}^s|}{b\Lambda^s} \tag{3.37}$$

Si l'on considère que la densité de dislocations mobiles évolue peu $(\dot{\rho}^s_m) \approx 0$ et que l'on néglige la densité de dislocations mobiles $(\rho^s_i >> \rho^s_m)$, on obtient :

$$\dot{\rho}^s = \dot{\rho}^s_i = \frac{|\dot{\gamma}^s|}{b\Lambda} - r^s_{ia} \tag{3.38}$$

Essman et Mughrabi [Essmann and Mughrabi, 1979] ont proposé une loi pour décrire le taux d'annihilation des dislocations immobiles :

$$r_{ia}^{s} = 2\frac{y_c}{b}\rho_i^s \left|\dot{\gamma}^s\right| \tag{3.39}$$

Ici, y_c est la distance moyenne contrôlant l'annihilation de dislocations : deux dislocations de même système peuvent s'annuler si la distance entre elles est plus petite que y_c. En combinant les équations 3.35, 3.38 et 3.39, on obtient :

$$\dot{\rho}^s = \frac{\left|\dot{\gamma}^s\right|}{b}\left(\frac{\sqrt{\sum_{u\neq s}\rho^u}}{K} - 2y_c\rho^s\right) \tag{3.40}$$

3.3.2 Le modèle utilisé

La loi d'évolution des densités de dislocations de Tabourot *et al* décrit l'écrouissage des métaux de structure CC au-dessus de la température de transition, mais n'est *a priori* pas adaptée au domaine de transition [Essmann and Mughrabi, 1979], [Mecking and Kocks, 1981]. Des modifications ont été entreprises pour tenir compte, de la manière la plus simple possible, de l'évolution des mécanismes élémentaires de plasticité lorsque $T < T_0$.

En exprimant le fait que les obstacles sont à la fois constitués par les interfaces entre les lattes (*via* le paramètre D_{latte}) et les dislocations perçant le plan de glissement du système (s), L'expression 3.40 devient :

$$\frac{1}{\Lambda^s} = \frac{1}{D_{grain}} + \frac{\sqrt{\sum_{u\neq s}\rho}}{K(T)} \tag{3.41}$$

Comme l'évolution de K en fonction de la température est mal connue à l'échelle de la plasticité cristalline, notre démarche a consisté à identifier K séparément à chaque température sur les essais mécaniques de traction simple afin de dégager une loi phénoménologique pour $K(T)$.

Dans le mécanisme d'annihilation, il faut faire intervenir une loi d'activation thermique. Rigoureusement, l'énergie d'activation associée à ce mécanisme doit dépendre de la cission effective sur le plan de glissement dévié. Dans un souci de simplicité, la distance critique d'annihilation $g_c = 2y_c$ suit une loi de type Arrhenius à deux paramètres :

- l'énergie d'activation E_{gc} est considérée comme constante ;
- un terme pré-exponentiel g_{c0} s'exprime

$$g_c\left(T\right) = g_{c0}\exp\left[-\frac{E_{gc}}{k_B T}\right] \tag{3.42}$$

  Cette loi phénoménologique permet de décrire continûment l'évolution du mécanisme d'annihilation avec la température.

La loi d'évolution des densités de dislocations devient donc :

$$\dot{\rho}^s = \frac{\left|\dot{\gamma}^s\right|}{b}\left(\frac{1}{D_{grain}} + \frac{\sqrt{\sum_{u\neq s}\rho^u}}{K(T)} - g_{c0}\exp\left[-\frac{E_{gc}}{k_B T}\right]\rho^s\right) \tag{3.43}$$

3.4 Synthèse du modèle de comportement retenu

Dans les sections précédentes, on a présenté la procédure d'établissement des lois dans le modèle Kocks et Rauch. Dans cette section, on va résumer la forme finale du modèle retenu.

Le modèle a été proposé pour décrire le comportement des métaux de structure cubique centrée à l'échelle cristalline. La plupart des modèles de la littérature sont dérivés de ceux utilisés pour les métaux de structure cubique face centré (CFC), et s'attachent à la description du comportement "haute température". Il semble donc naturel de prendre comme base les lois décrivant la plasticité dans le régime athermique ($T > T_a$) pour étendre la description au domaine de transition de comportement plastique. Il est toutefois nécessaire de formuler des lois de comportement prenant en compte les mécanismes spécifiques aux basses températures ($T < T_a$), tels que le mécanisme de double décrochement ou encore l'activation préférentielle des systèmes de glissement $< 111 > \{110\}$ par rapport aux $< 111 > \{112\}$.

3.4.1 Loi d'écoulement

La loi d'écoulement du modèle est basée sur le mouvement thermiquement activé des segments vis. L'équation 3.44 est déduite de l'expression du glissement plastique établie par Louchet *et al* [Louchet et al., 1979].

$$\dot{\gamma}^s = \gamma_0 exp\left[\frac{\Delta G(\tau_{eff})}{k_b T} sign(\tau_s)\right] \tag{3.44}$$

L'énergie d'activation est directement reliée au cisaillement effectif τ_{eff} s'exerçant sur le système de glissement (s). Ce cisaillement est égal au cisaillement retranché de la distribution "athermique" due aux obstacles (dislocation de type forêt et précipités). L'expression utilisée provient de la description phénoménologique proposée par Kocks *et al* [Kocks et al., 1975] :

$$\Delta G(\tau_{eff}) = \Delta G_0 \left(1 - \left(\frac{\tau_{eff}}{\tau_R}\right)^p\right)^q \tag{3.45}$$

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

3.4.2 Loi d'écrouissage

L'évolution de l'écrouissage repose sur la compétition entre les interactions entre les dislocations à courte et longue distance. Les interactions à courte distance désignent essentiellement la friction de réseau qui génère une contrainte effective τ_{eff}. Les interactions à longue distance quant à elles, proviennent de la présence de dislocations de forêt τ_{int}, de précipités et des joints des grains τ_0.

La contrainte d'écoulement requise pour activer le glissement plastique est alors égale à la somme de ces trois contributions :

$$\tau^s = \tau^s_{eff} + \tau^s_{int} + \tau_0 \tag{3.46}$$

Le modèle proposé par Rauch [Rauch, 1993] établit une expression particulière de la contrainte interne, en raisonnant sur un brin de dislocation épinglé sur deux obstacles et présentant une partie vis soumise à la friction de réseau, ainsi qu'une partie mixte :

$$\tau_{int} = \frac{(\alpha\mu b)^2\rho}{\tau^s} \tag{3.47}$$

où ρ désigne la densité totale de dislocations perçant le système s. L'effet des précipités et joint des grains est pris en compte en soustrayant τ_0 du dénominateur dans l'expression 3.47. Afin de présenter individuellement l'interaction du système s avec chacun de 23 systèmes u potentiellement latents, le terme $\alpha^2\rho$ est remplacé par $\sum_u \alpha^{su}\rho^u$.

$$\tau_{int} = \frac{(\mu b)^2 \sum_u \alpha^{su}\rho^u}{\tau^s - \tau_0} \tag{3.48}$$

L'anisotropie de la matrice d'interaction de composantes a^{su} influe sur l'écrouissage au début de la déformation, mais l'effet s'estompe par la suite : dans le cadre de l'étude de l'influence de la plasticité sur l'amorçage de la rupture, cela a amené Libert à faire l'hypothèse qu'elle est isotrope.

La plasticité à froid dans les métaux de structure cubique centrée se caractérise également par une non équivalence des systèmes de glissement $< 111 > \{110\}$ et $< 111 > \{112\}$, ces derniers s'activant de plus en plus difficilement au fur à mesure que T diminue. La nature de ces mécanismes étant encore mal comprise, l'approche de Libert a consisté à identifier l'écart entre les familles de systèmes $\{110\}$ et $\{112\}$ sur les résultats expérimentaux obtenus sur le fer pur. L'écart entre les familles de systèmes est porté par le terme $f(T)$, qui est supposé constant pour les systèmes $< 111 > \{110\}$ et linéairement dépendant de la température pour les systèmes $< 111 > \{112\}$:

$$\tau_0^{\{110\}} = \tau_0 \tag{3.49}$$

$$\tau_0^{\{112\}} = \tau_0 + f(T) \tag{3.50}$$

3.4.3 Loi d'évolution des densités de dislocation

La loi d'évolution des densités de dislocations est celle du modèle de plasticité cristalline du modèle de Tabourot, qui décrit l'écrouissage des métaux de structure CC lorsque $T > Ta$. Toutefois, la paramétrisation des constantes K et g_c est modifiée pour tenir compte de l'évolution des mécanismes de déformation "basse température" :

$$\dot{\rho}^s = \frac{\mid \dot{\gamma}^s \mid}{b}\left(\frac{1}{D_{grain}} + \frac{\sqrt{\sum_{s\neq u}\rho^u}}{K(T)} - g_c(T)\rho^s\right) \tag{3.51}$$

D'une part, le paramètre K est relié à l'efficacité du mécanisme de multiplication des dislocations : plus la valeur de K est grande, moins les sources de dislocations sont efficaces. Comme les mécanismes de multiplication sont affectés par la transition plastique, Libert *et al* [Libert, 2007a] ont choisi d'identifier K séparément à chaque température sur les essais mécaniques de traction simple afin de dégager une loi phénoménologique $K(T)$.

D'autre part, le processus d'annihilation étant commandé par le mécanisme de glissement dévié, Libert *et al* ont choisi une loi de type Arrhenius pour décrire l'évolution de g_c en fonction de

T. L'énergie d'activation E_{gc} associée à ce mécanisme doit en principe dépendre du cisaillement effectif sur le plan de glissement dévié : dans un souci de simplification, ils ont supposé E_{gc} constante :

$$g_c(T) = g_{c0} exp\left(-\frac{E_{gc}}{k_B T}\right) \tag{3.52}$$

Chapitre 4

Influence de l'irradiation neutronique sur le comportement mécanique de l'acier de cuve

Un des deux objectifs principaux de la thèse est modifier les lois du modèle pour prendre en compte l'effet d'irradiation. C'est pourquoi ce chapitre est consacré à l'étude de l'influence de l'irradiation neutronique sur le comportement mécanique de l'acier de cuve.

4.1 Généralités

Tous les matériaux métalliques présents dans les cœurs des réacteurs nucléaires sont soumis à un bombardement par les neutrons produits par les réactions de fission du combustible (phénomène d'irradiation). Les effets les plus importants sur la fonctionalité des matériaux sont de deux types :

- modifications de propriétés mécaniques (durcissement, fragilisation,...) qui concernent tous les matériaux irradiés, dont l'acier de cuve des réacteurs à eau pressurisée (REP) ;
- changements de forme ou de volume (fluage, gonflement, croissance,...) qui concernent plus particulièrement les matériaux de gainage des combustibles et ceux des composants internes de cuve, beaucoup plus proches de la source de rayonnement.

Dans le cas de l'acier de cuve, les effets d'irradiation sont actifs durant toute la durée de vie du réacteur, dont la température de service, voisine celle du fluide caloporteur, est de l'ordre de 290°C .

4.2 Processus de création des défauts

4.2.1 Emission de neutrons

La fission d'un atome de combustible (oxyde d'uranium en général) crée deux produits de fission de masse voisine de 100(uma), et deux ou trois neutrons, d'énergie de l'ordre du MeV. L'énergie de fission de l'atome (200MeV) se retrouve essentiellement sous forme d'énergie cinétique dans les produits de fission. Ces derniers, fortement ionisés, perdent rapidement leur

énergie par interaction avec les atomes de combustible environnants. De plus, leur parcours est très faible, de l'ordre de quelques dizaines de nanomètres.

A l'inverse, les neutrons de fission, particules neutres électriquement, interagissent peu avec les atomes de la matière dans laquelle ils se déplacent, et parcourent de ce fait des distances moyennes plus importantes (plusieurs dizaines de cm) avant de dissiper leur énergie et d'être arrêtés.

4.2.2 Interactions avec les réseaux cristallins

Toute matière se trouvant dans le cœur du réacteur est ainsi soumise à un flux de neutrons (où bombardement neutronique), de l'ordre de 10^{14} neutrons.s^{-1}.cm^{-2} dans le cas des REP. Le matériau de la cuve lui-même subit un flux de neutrons, beaucoup plus faible de l'ordre de 10^{12} du fait de l'éloignement de la source.

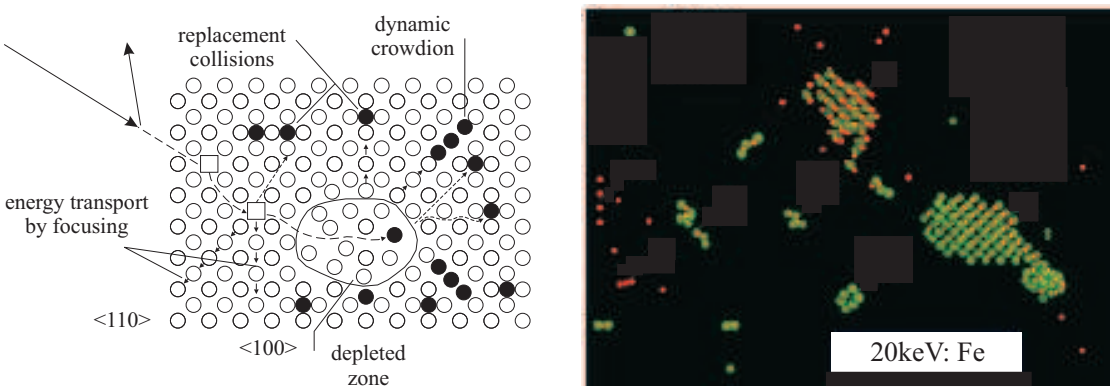
Lorsque les neutrons traversent le réseau cristallin, ils peuvent entrer en collision, soit avec des électrons, soit avec des noyaux atomiques. Lorsqu'un neutron rencontre un électron, celui-ci acquiert de l'énergie dans le "choc" et il est chassé de son orbite : l'atome est ionisé et le neutron est légèrement ralenti. Dans les réseaux métalliques, où il existe des électrons de conduction, l'atome ionisé retrouve presque immédiatement un électron disponible, et la seule manifestation de cette interaction neutron–électron est une petite élévation locale de température, très rapidement dissipée. Dans le cas d'une rencontre avec un noyau, le neutron cède de l'énergie à ce dernier, il est dévié et ralenti. Dans le cas du fer, l'énergie cédée au noyau par un neutron de 1 MeV est voisine de 40 keV.

4.2.3 Conséquence sur les réseaux cristallins

Pour qu'un atome puisse se déplacer dans un édifice cristallin, il doit écarter les atomes voisins. L'énergie nécessaire au déplacement, appelée énergie de seuil (ES) est de l'ordre de 25 eV, soit (1/1600) de l'énergie cédée par un neutron irradié. On voit donc que l'énergie acquise par le noyau lors du choc est très supérieure à ES. L'atome va donc quitter son site dans le réseau avec une très grande vitesse. Chaque atome ainsi éjecté (primaire) se comporte comme une particule rapide qui produit à son tour des chocs atomiques et déplace d'autres atomes du réseau (secondaire). Le processus ne s'arrête que lorsque les particules secondaires, à l'issue de plusieurs séries de chocs, voient leur énergie réduite à une valeur inférieure à ES. On comprend donc qu'un seul neutron incident peut conduire à un grand nombre de collisions et de déplacements atomiques dans le réseau métallique. On obtient ce que l'on appelle une "cascade" de déplacements (Fig. 4.1).

Il en résulte dans le réseau cristallin des atomes chassés de leur site, laissant à leur place une lacune. Les atomes déplacés, dits auto-interstitiels, finissent par s'arrêter dans le réseau, en dehors d'un site normal, en position interstitielle, en écartant les atomes voisins et déformant ainsi le réseau.

Les atomes en position interstitielle et les lacunes schématisés en figure 4.2 sont des défauts ponctuels créés en nombres égaux par l'irradiation (chaque couple lacune-atome interstitiel est appelé "paire de Frenkel"). Si un interstitiel et une lacune sont suffisamment proches l'un de l'autre, ils peuvent se recombiner par simple interaction élastique due à la distorsion du réseau autour de l'interstitiel. Ce phénomène limite automatiquement la concentration de défauts créés



a) b)

FIG. 4.1. *Cascade de déplacement : (a) schématisée [Seeger, 1958], (b)calculée [Bacon et al., 2006]*

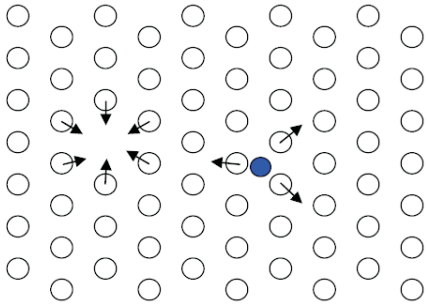


FIG. 4.2. *Paire de Frenkel : un auto-interstitiel et une lacune [CEA,]*

par l'irradiation, même pour des températures où la diffusion ne peut intervenir (recombinaison athermique).

Le tableau 4.1 présente la succession d'événements et le temps caractéristique associés lors d'un choc neutron–atome du réseau.

4.2.4 Migration des défauts

Comme indiqué dans le tableau 4.1, au-delà de 10^{-8} seconde après le choc, les lacunes et les atomes interstitiels peuvent se déplacer par sauts dans le réseau. Ce phénomène, dit de diffusion, est thermiquement activé. La migration de l'auto-interstitiel du fer est présenté en figure 4.3.

Atomes et lacunes peuvent donc se recombiner, ou bien être attirés pas des "puits" de défauts : marches à la surface du cristal, cran de dislocation, joints de grains... Ils peuvent également se former en amas 1D, 2D ou 3D. Des lacunes peuvent donc se rassembler en amas pour former des amas lacunaires mais éventuellement des cavités aux températures comprises approximativement entre le tiers et la moitié de la température de fusion (Fig. 4.4 a et b). Les amas lacunaires conduisent à l'apparition de boucles lacunaires (Fig. 4.4 c). La formation d'amas insterstitiel se fait par capture de plus petits amas qui restent très mobiles jusqu'à 4 interstitiels.

Temps (s)	Evènement	Conséquence
10^{-18}	Transfert d'énergie neutron-atome	Création du PKA (Primary Knocked Atom)
10^{-13}	Déplacement des atomes du réseau par le PKA	Cascade de déplacement
10^{-11}	Dissipation de l'énergie, recombinaison et formation d'amas de défauts ponctuels	Création de paires de Frenkel (auto-interstitiel et lacune) Création d'amas d'auto-interstitiel et d'amas de lacunes
$> 10^{-8}$	Réactions entre défauts par diffusion : recombinaison, piégeage et émission de défauts ponctuels	Evolution de la population d'amas

TAB. *4.1. Echelle de temps des évènements lors d'un choc d'un neutron avec un atome du réseau [Ullmaier and Shilling, 1980]*

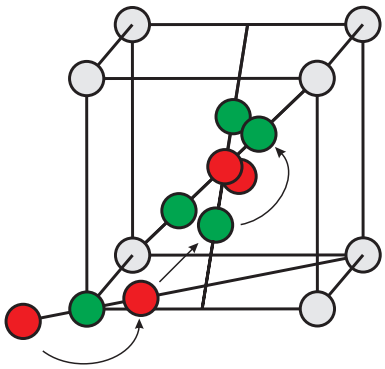


FIG. *4.3. Migration de l'auto-interstitiel du Fe (di-interstitiel) par translation et rotation*

Au-delà d'une certaine taille les amas interstitiels forment des boucles interstitielles (Fig. 4.4 d).

Au cours de l'irradiation, les boucles croissent jusqu'à une certaine taille pour laquelle elles peuvent interagir avec les autres dislocations présentes dans le matériau. Dans les alliages, la présence d'interstitiels et de lacunes favorise les ségrégations de certains éléments. Ainsi, dans les aciers de cuves, des amas de Cu, Mn, Ni et Si peuvent se former [Carter et al., 2001], [Radiguet, 2006] (Fig. 4.5). Le rôle durcissant de ces amas n'est pas connu. Par contre, pour les très fortes teneur en Cu (ce qui n'est pas le cas des aciers de cuve employés en France), des précipités apparaissent et contribuent très fortement au durcissement.

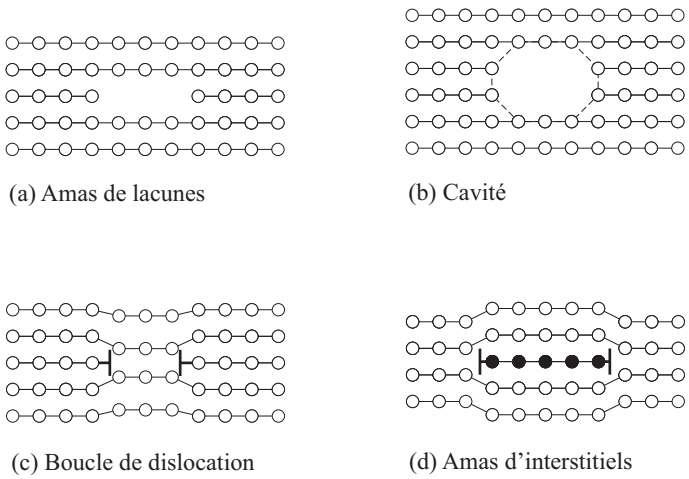


FIG. 4.4. *Schémas de principe de différents cas de rassemblements de défauts en amas dans les réseaux cristallins.*

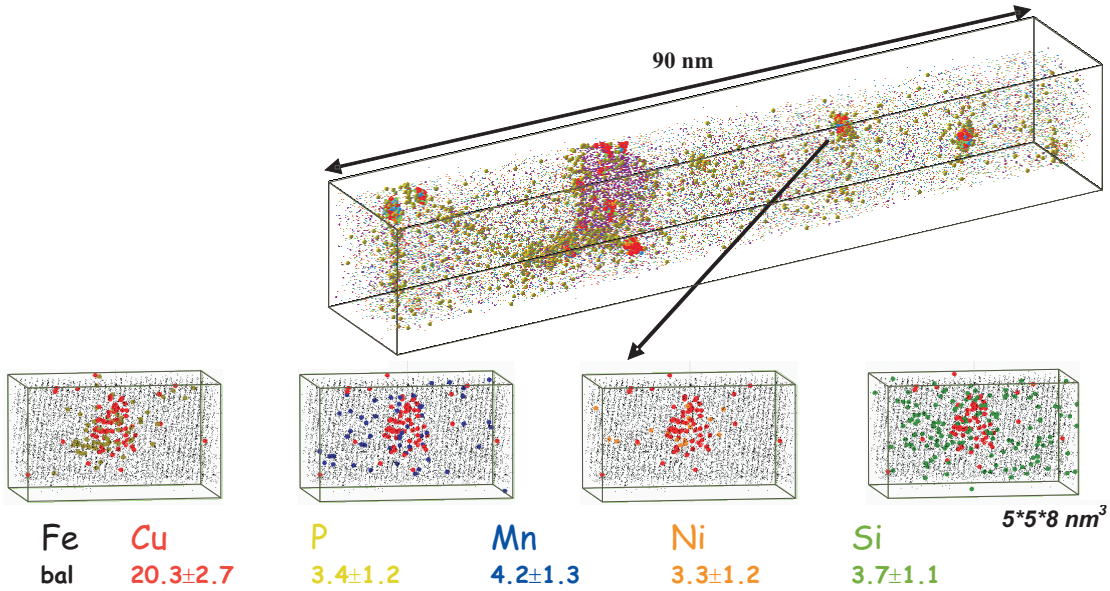


FIG. 4.5. *Amas de solutés dans un acier de cuve irradié observé en sonde atomique tomographique. [Radiguet, 2006]*

4.2.5 Interaction entre défauts d'irradiation et dislocations

Le durcissement observé après irradiation provient en premier lieu de l'interaction entre des dislocations avec des défauts d'irradiation (boucles interstitielles et cavités). Donc la compréhension des mécanismes de cette interaction est une des clés fondamentales pour introduire l'effet de l'irradiation dans un modèle de plasticité.

4.2.5.1 Les défauts d'irradiation

Cavités. Ces défauts ont un rayon de l'ordre du nm et leur densité est d'environ $10^{24}\mathrm{m}^{-3}$, pour une fluence de $10^{19}\mathrm{n/cm}^2$ ($E \geqslant 1MeV$) et une température d'irradiation de 290°C [Odette and Wirth, 1997], [Li, 1995]. Ils ancrent les dislocations par un mécanisme étudié par Coulomb et Friedel [Coulomb and Friedel, 1956]. Ces auteurs considèrent que si le rayon r de la cavité est plus grand que celui du cœur des dislocation, l'énergie fixée (E_{Bind}) est approximativement calculée par l'énergie correspondant au segment de ligne de dislocation disparu : $E_{Bind} = 2rE_{line}$ où E_{Line} est l'énergie du ligne de dislocation par unité de longueur ($E_{Line} \simeq \mu b^2/2$, μ module de cisaillement et b le vecteur de Burgers). Osetsky et Bacon [Bacon and Osetsky, 2007] reconfirment ce résultat par simulation en dynamique moléculaire (DM) pour une dislocation coin. Ces calculs montrent que la contrainte nécessaire à une dislocation pour vaincre l'obstacle dépend du diamètre de la cavité (Fig. 4.6).

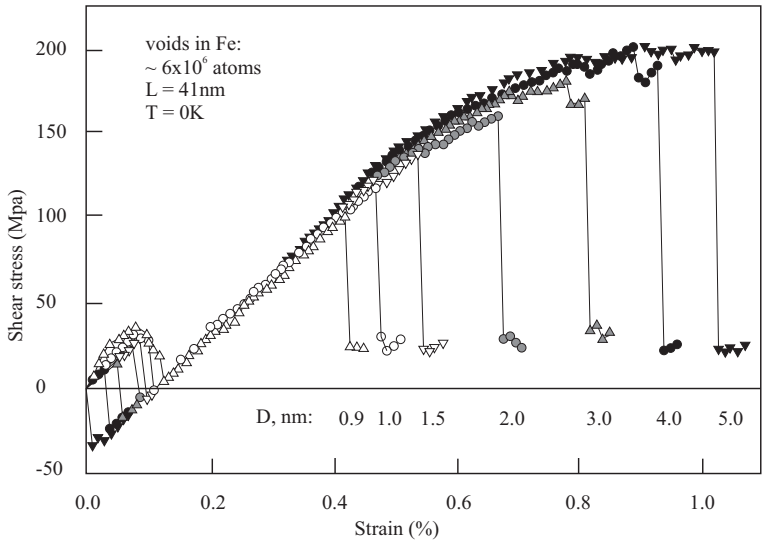


FIG. *4.6. Courbes contrainte–déformation induite par l'interaction d'une dislocation avec une cavité de taille D comprise entre 0,9 et 5 nm [Bacon and Osetsky, 2007]*

Un calcul élastique plus précis de Bullough et Newman [Bullough and Newman, 1962] a montré que l'interaction élastique à longue distance entre dislocation vis et cavité est donnée par

$$E_{\text{inter}} = -\frac{5\mu b^2 r^2 (1-\nu)}{2\pi(7-5\nu)d^2} \tag{4.1}$$

où d est la distance entre deux défauts et ν, le coefficient de Poisson. Pour une dislocation tangentielle à la cavité, ils donnent une énergie approximative en remplaçant dans cette expression par $d = r$ (donc $E_{\text{inter}} \simeq \mu b^2/10$). Ils ont aussi estimé que la force est $\mu b^2/5$ quand le plan de glissement passe sur le centre de cavité et, en moyenne $\mu b^2/10$.

Boucle de dislocation. Ces défauts sont nanométriques et leur densité est proche de quelques $10^{24}\mathrm{m}^{-3}$, pour une fluence de $10^{19}\mathrm{n/cm}^2$ ($E \geqslant 1MeV$) et une température d'irradiation d'environ 290°C. Les examens en MET d'alliage ferritique irradié à forte dose ($\geqslant 1dpa$) [Ward and Fisher, 1989], ainsi que la simulation de MD [Wirth et al., 2000],

[Osetsky et al., 2000], [Marian et al., 2002] ont montré que leurs vecteurs de Burgers étaient $1/2< 111 >$ ou $< 100 >$. Les interactions entre boucles et dislocations peuvent être classées en deux catégories, interactions élastiques et interactions réactionnelles. Le cas de l'interaction élastique entre boucle et dislocation a été étudié par le calcul dans la littérature [Kroupa, 1962], [Kroupa, 1966], [Hirth and Lothe, 1982], [Rhee et al., 1998], en utilisant une approche en élasticité isotrope. Une dislocation peut être attirée ou repoussée par la boucle de dislocation en fonction de leurs positions relatives et de leurs vecteurs de Burgers. L'interaction réactionnelle se manifeste quand la boucle et la dislocation entrent en contact. Elles peuvent alors se combiner et créer des jonctions, qui peuvent arrêter le mouvement de la dislocation. Friedel a estimé que la force causée par la jonction est $F_{max} \simeq \mu b^2/4$ [Friedel, 1969]. Kimura et Maddin ont proposé une valeur de $\mu b^2/8$ [Kimura and Maddin, 1965]. Foreman et Sharp ont décrit un mécanisme donc les boucles se combinent avec des dislocations pour former un segment de dislocation glissile. Hirch [Hirsch, 1976] a étudié un autre mécanisme, où la réaction conduit à la formation d'un tour d'hélice sur la dislocation. Les calculs de dynamique moléculaire permettent également d'étudier l'interaction d'une dislocation avec une boucle de dislocation. Ils permettent de mettre en évidence la complexité de cette interaction et d'en estimer la force (Fig. 4.7).

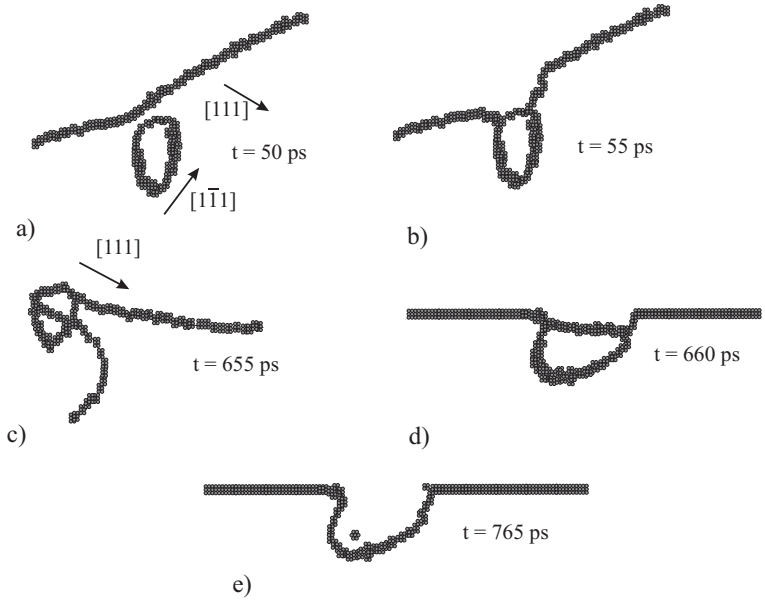


FIG. *4.7. Interaction d'une dislocation avec une boucle interstitielle à température ambiante [Bacon et al., 2006]*

Précipités riches de cuivre. Ces défauts ont une taille nanométrique et leur densité peut atteindre $10^{24}\mathrm{m}^{-3}$, pour une fluence de $10^{19}\mathrm{n/cm}^2$ ($E \geq 1MeV$) à une température d'irradiation d'environ 290°C. Dans les aciers de cuve, ils contiennent du Mn, Si, Ni et probablement du Fe. Les examens en Sonde Atomique Tomographique [Pareige, 1994] d'alliages binaires ($Fe - 0.7\%Cu, Fe - 1.4\%Cu$) irradiés à 288°C donnent une vue précise de la morphologie des précipités de cuivre crées par irradiation (Fig. 4.5). Ces précipités sont constitués d'une zone de cœur d'environ 1 nm qui contient environ 80% de cuivre, et qui est entourée d'une interface diffuse avec la matrice. Les précipités riches de cuivre crées par l'irradiation dans les aciers de cuve sont

connus pour avoir une structure similaire. Des examens de ces aciers [Pareige, 1994] montrent que Ni, Mn et Si se concentrent sur les interfaces entre des précipités de cuivre et la matrice. Les précipités riches en cuivre sont attractifs pour les dislocations par interaction élastique. Des calculs en dynamique moléculaire réalisés par Harry et Bacon [Harry and Bacon, 2002] montrent que le cœur d'une dislocation vis interagit avec les précipités en modifiant leur structure et diminuent l'énergie de configuration. Plus gros sont les précipités, plus il est facile pour les dislocations de modifier ces structures en structures CFC. La présence des précipités riches en cuivre augmente la difficulté de déplacement des dislocations.

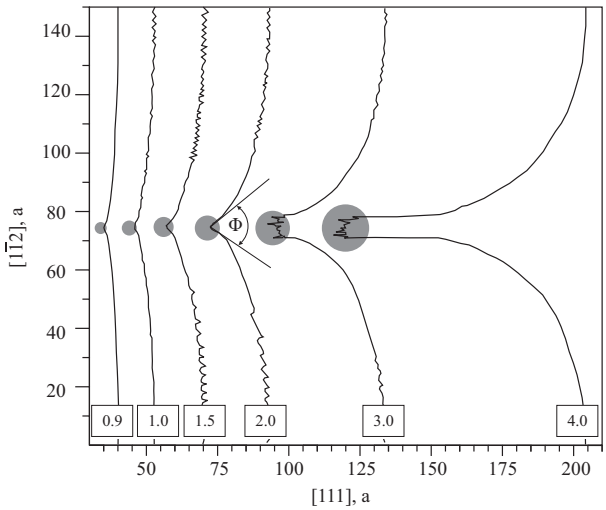


FIG. *4.8. Interaction d'une dislocation coin avec un précipité de cuivre dans le fer [Bacon and Osetsky, 2004]*

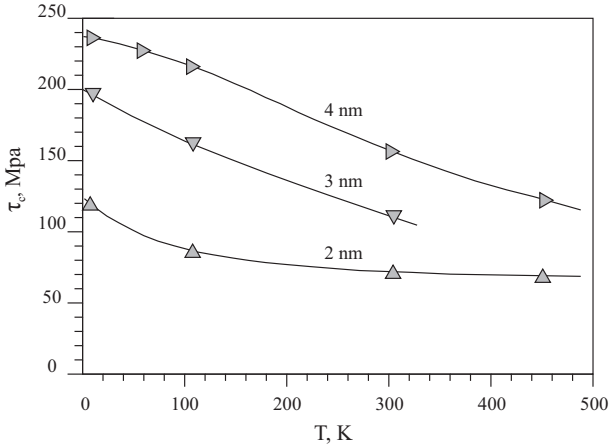


FIG. *4.9. Contrainte critique de libération d'une dislocation coin d'un précipité de cuivre dans le fer en fonction de sa taille et de la température calculée en dynamique moléculaire [Bacon and Osetsky, 2004]*

4.2.5.2 Activation thermique

Lorsqu'on aumente la température, les dislocations peuvent surmonter les défauts d'irradiation de plus en plus facilement grâce à l'activation thermique, qui, de fait, affaiblit l'interaction entre dislocations et défauts. Bacon et Osetsky [Bacon and Osetsky, 2005] ont montré par DM que la cission résolue nécessaire pour qu'une dislocation coin cisaille un précipité de cuivre pur diminue quand la température augmente (Fig. 4.9).

Quand la température augmente, la fluctuation atomique augmente, ce qui peut aider les dislocations à surmonter des petits défauts. Ce processus est caractérisé par la diminution de la limite d'élasticité. Comme observé par Kirk *et al* [Kirk et al., 2001], la dépendance en température de l'acier RPV semble indépendante de la présence des défauts d'irradiation. L'activation thermique nécessaire pour surmonter des défauts d'irradiation est en fait contrôlée par la forte dépendance en température de la mobilité des dislocations vis. L'observation de Kirk est vérifiée par des simulation de Bacon et Osetsky [Bacon and Osetsky, 2005]. Les résultats montrent la faible dépendance en température de la contrainte de cisaillement nécessaire pour surmonter des petits défauts ($R < 1$ nm) dans le fer quand la température est inférieure à -173°C .

4.3 Effet de l'irradiation sur les propriétés mécaniques

Dans ce paragraphe, on décrit de façon générale l'évolution des propriétés mécaniques par irradiation. Le changement des propriétés mécaniques par irradiation se manifeste notamment sur l'acier de cuve par une augmentation de la limite d'élasticité du matériau, la température de transition de la résilience, ainsi que de la dureté Vickers.

4.3.1 Augmentation de la limite d'élasticité

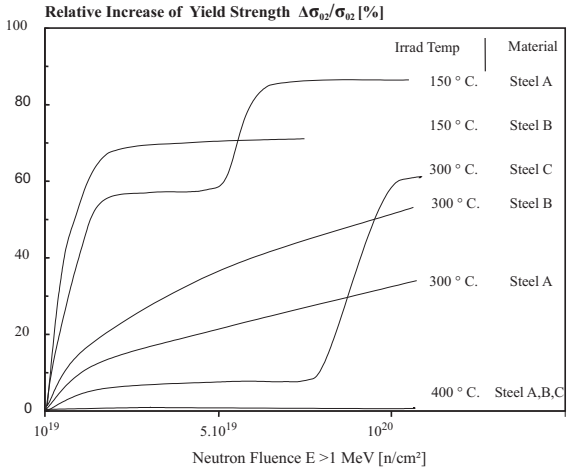


FIG. *4.10. Effet du flux neutronique ($E \geqslant 1$ MeV) sur la croissance relative de la limite d'élasticité [Marini, 2006]*

Les résultats des essais de traction simple (Fig. 4.10) ont montré que l'augmentation de la limite d'élasticité n'est pas la même pour les différents types d'aciers E.25 et pour les différentes températures d'irradiation. On remarque que la limite d'élasticité augmente avec la dose d'irradiation reçue, mais que l'augmentation de la température d'irradiation réduit son effet.

4.3.2 Les courbes contrainte-déformation

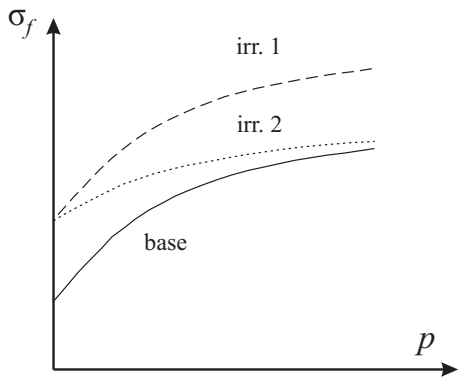


FIG. *4.11. Deux possibilités d'évolution de la courbe contrainte-déformation après irradiation [Tanguy et al., 2005a]*

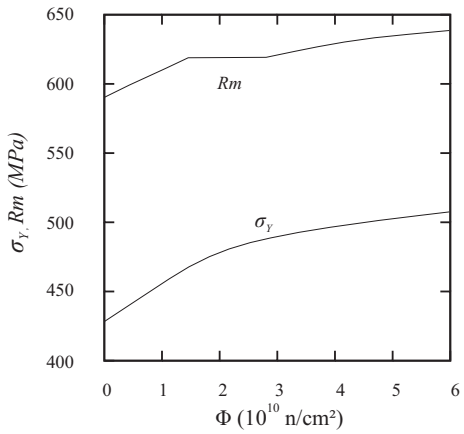


FIG. *4.12. Evolution de la limite d'élasticité et de la contrainte maximale en fonction du flux d'irradiation [EDF, 2001]*

L'irradiation peut affecter les courbes contrainte–déformation de deux manières, comme le résume schématiquement la figure 4.11.

La première solution (irr.1) considère que la courbe contrainte–déformation est translatée uniformément, la deuxième (irr.2) introduit une augmentation de la limite d'élasticité mais suppose que la contrainte maximale n'est pas effectée. Pour notre matériau, dont les données exprérimentales proviennent du programme francais de surveillance, l'irradiation augmente non seulement la limite d'élasticité mais aussi la contrainte maximale (Fig. 4.12).

4.3.3 Augmentation de la température de transition Charpy

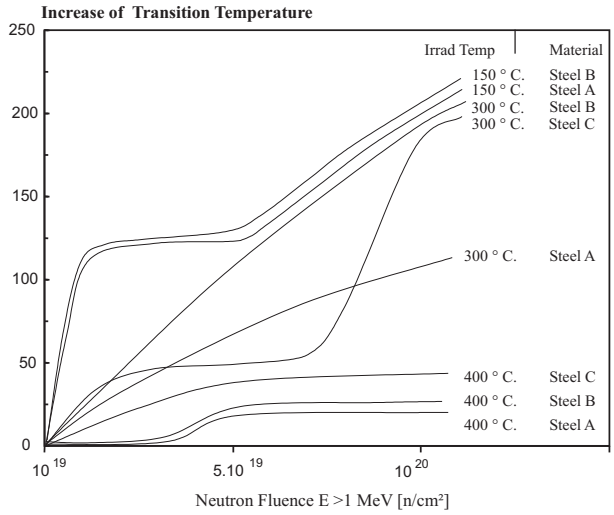


FIG. *4.13. Effet du flux neutronique sur l'augmentation de la température de transition (E ⩾ 1 MeV) [CEA,]*

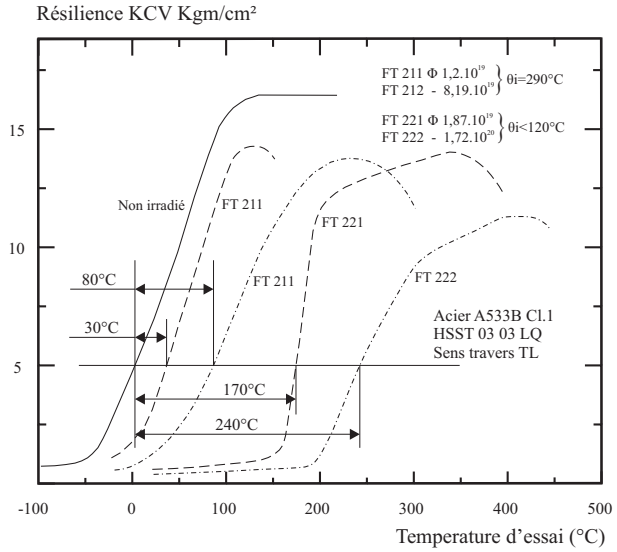


FIG. *4.14. Décalage de la courbe de résilience par l'effet du flux neutronique (E ⩾ 1 MeV) [Marini, 2006]*

L'acier ferritique se montre sujet à la rupture fragile à basse température et présente une rupture ductile à température élevée avec haute énergie. A la température de transition, la rupture fragile est précédée par une portion de rupture ductile ; les deux mécanismes co-existent. Il y a plus d'un siècle que le test Charpy a été utilisé pour déterminer la température de transition. Celle-ci est déterminée à partir des courbes d'énergie dissipée à différentes températures.

Sur les figures 4.13, 4.14 on constate que la température de transition augmente avec l'irradiation, mais que si on augmente la température d'irradiation, on diminue l'effet de l'irradiation.

4.3.4 Diminution de l'énergie de palier ductile

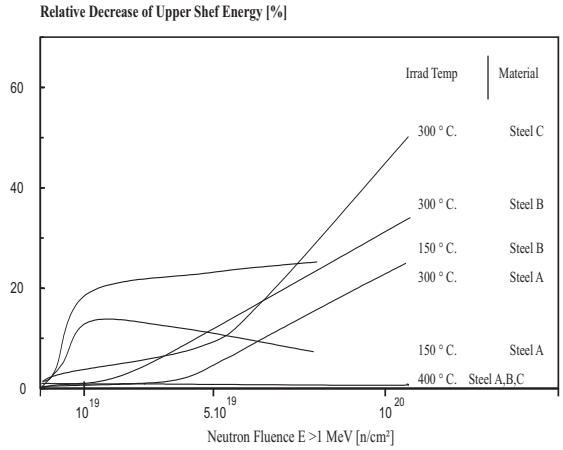


FIG. *4.15. Effet du flux neutronique (E ⩾ 1 MeV) sur la décroissance relative de l'énergie au palier ductile [CEA,]*

Les essais Charpy réalisés sur des aciers irradiés et comparés avec des résultats obtenus sur matériau non-irradié ont montré que l'irradiation ne change pas le palier de basse d'énergie qui correspond à la rupture fragile et qu'au contraire l'irradiation change significativement le palier haut qui correspond à la rupture ductile (Fig. 4.15).

4.3.5 Augmentation de la dureté Vickers

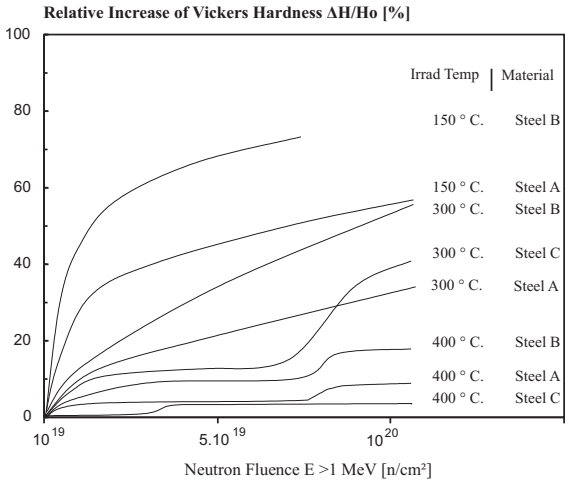


FIG. *4.16. Effet du flux neutronique (E ⩾ 1 MeV) sur la dureté Vickers. [CEA,]*

On voit sur la figure 4.16 que l'irradiation modifie fortement la dureté Vickers. Plus haute est la dose d'irradiation, plus durs sont les matériaux et au contraire plus haute est la température d'irradiation, plus petite est l'augmentation de la dureté.

4.3.6 Diminution de la ténacité

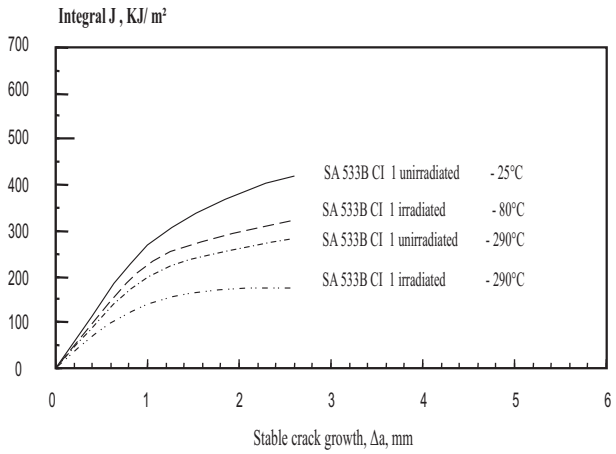


FIG. *4.17. Effet du flux neutronique (E ⩾ 1 MeV) sur la ténécité [CEA,].*

Une des caractéristiques mécaniques importantes pour l'acier 16MND5 est la ténacité, qui détermine la résistance à la propagation des fissures. Cette caractéristique se dégrade sous l'effet de l'irradiation. La figure 4.17 montre la variation de la résistance à la déchirure en fonction de la température de sollicitation et de l'irradiation.

4.3.7 Effets du flux et de la dose neutronique

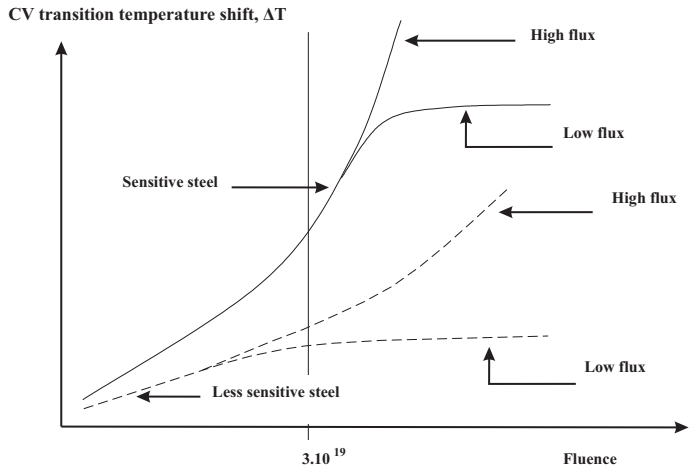


FIG. *4.18. Description schématique des effets possibles du flux neutronique sur la fragilisation par irradiation [CEA,]*

La figure 4.18 montre que la fragilisation dépend non seulement de la fluence mais aussi du flux de neutrons. Il y a une saturation de la fragilisation qui apparaît pour les faibles flux de neutrons, mais elle n'est pas observée dans le cas des flux élevés.

4.3.8 Effet dans le domaine des sollicitations cycliques

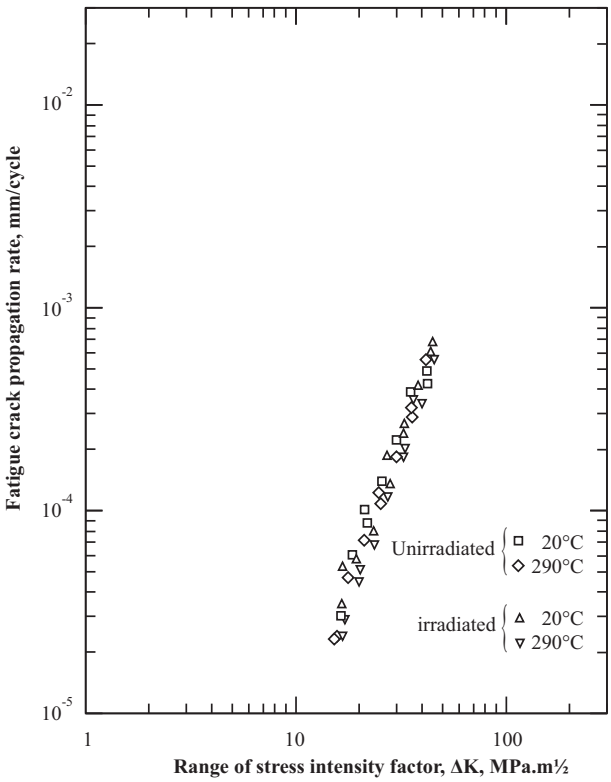


FIG. *4.19. Absence d'effet de l'irradiation sur la propagation des fissures en fatigue [Marini, 2006]*

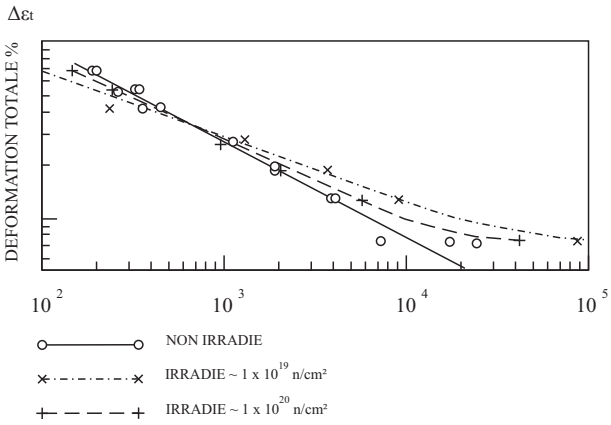


FIG. *4.20. Effet de l'irradiation sur la durée de vie en sollicitation cyclique [Marini, 2006]*

Pour les sollicitations cycliques, il n'y a pas d'effet de l'irradiation dans le domaine oligocyclique de la propagation des fissures en fatigue (Fig. 4.19). Il y a par contre un effet bénéfique sur la durée de vie en fatigue à grand nombre de cycles (Fig. 4.20).

4.3.9 Influence des éléments d'alliage

Malgré les faibles teneurs massiques d'éléments d'alliage dans l'acier de cuve, ceux-ci jouent un rôle important dans le changement des propriétés mécaniques sous irradiation, en contribuant à la fragilisation sous irradiation. Les effets sont résumés ci-dessous :

Ni : augmente la sensibilité à la fragilisation ;
Sn : augmente la sensibilité à la fragilisation ;
Mn : augmente probablement la sensibilité ;
Mo : pas d'influence sensible ;
N : durcissant ;
C : probablement durcissant.

Impuretés :

Cu : augmente la sensibilité à la fragilisation par durcissement ;
P : augmente la sensibilité à la fragilisation par ségrégation ;
S : pas d'influence sensible.

On peut trouver dans la littérature quelques formulations empiriques proposées pour prévenir de l'augmentation de RT_{NDT} en fonction des teneurs en éléments d'alliage et de la fluence :

$$\Delta RT_{NDT} = [22 + 556(Cu - 0.08) + 2778(P - 0.008)] \,.\, \left[\phi/10^{19}\right]^{0.5}$$
$$\Delta RT_{NDT} = [17.3 + 238(Cu - 0.08) + 1537(P - 0.008) + 191(Ni2Cu)] \,.\, \left[\phi/10^{19}\right]^{0.35}$$
$$\Delta RT_{NDT} = 8 + [24 + 238(Cu - 0.08) + 1537(P - 0.008) + 191(Ni2Cu)] \,.\, \left[\phi/10^{19}\right]^{0.35}$$

4.3.10 Régénération des caractéristiques mécaniques

D'après Serpan et Hawthorne un recuit (*annealing*) à température de 56 à 111°C au-dessus de la température d'irradiation en service, permet de réduire considérablement le niveau de fragilisation.

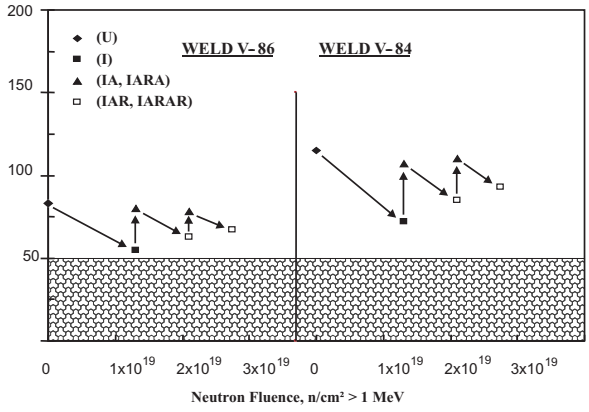


FIG. *4.21. Evolution de l'énergie au palier ductile de la courbe de résilience au cours de cycles, irradiation recuits de régénération à 399° C (joints soudés de l'acier SA 533 gr.B.) - U non irradié, I irradié, IA irradié + régénéré, IAIA = IA + réirradié + régénéré, IAA = IA + réirradié, IARAR = IARA + réirradié*

La figure 4.21 présente sur l'acier A533 gr.B l'évolution de l'énergie au palier ductile de la courbe de résilience, au cours de cycles d'irradiation–recuit à 399°C , le matériau semblant revenir progressivement à son niveau d'énergie de rupture initial.

4.4 Conclusions

Les flux neutroniques créés dans la réaction de fission produisent des cascades de déplacements atomiques dans les aciers. Ce phénomène fait apparaître des défauts ponctuels libres ainsi que des amas de défauts ponctuels. Les défauts ponctuels libres accélèrent la ségrégation qui affaiblit les interfaces entre les grains. Les défauts ponctuels libres accélèrent aussi la précipitation, les précipités créés avec les amas de défauts ponctuels gênent le mouvement des dislocations. C'est l'origine du changement des propriétés mécaniques par l'irradiation.

L'acier est d'autant plus sensible au phénomène que les teneurs en Cu, P, Sn, et Ni sont élevées, ce qui a conduit à une réduction progressive de ces teneurs dans l'acier et dans les joints soudés. La fragilisation intervient à température de service des réacteurs ($\simeq 290°C$), mais décroît avec l'augmentation de la température d'irradiation. Son amplitude dépend de la fluence et du flux d'irradiation reçu par l'acier.

L'irradiation influence de plusieurs manières les propriétés mécaniques. Dans ce travail, nous nous concentrons sur l'évolution de la ténacité.

Chapitre 5

Rupture Fragile

Le deuxième objectif de la thèse est de faire des propositions nouvelles pour construire un modèle de rupture fragile à échelle de la microstructure, qui soit donc basé sur les champs mécaniques résultants de simulations micromécaniques. Ce chapitre rappelle donc les principaux concepts de la rupture fragile, à l'échelle de la pièce, mais considère aussi les micromécanismes responsables.

5.1 Généralités

La rupture fragile est caractérisée par une défaillance de la pièce en l'absence de déformation plastique macroscopique. Elle correspond donc à la propagation très rapide des fissures avec une faible consommation d'énergie. La rupture est bien nette, on parle de rupture par clivage.

Les clivages se produisent de préférence le long de plans atomiques denses. Pour les structures atomiques cubiques centrées, comme c'est le cas dans les aciers ferritiques, les plans cristallographiques sont indicés {100}.

A la traversée de sous-joints, de joints de macle, de joints de grains, l'orientation des plans de clivage change. Pour compenser les désorientations, il apparaît des marches sur la surface de rupture.

Macroscopiquement les surfaces de rupture sont perpendiculaires à la contrainte maximale. En mécanique de la rupture, ce mode de rupture est appelé mode I (Fig. 5.1).

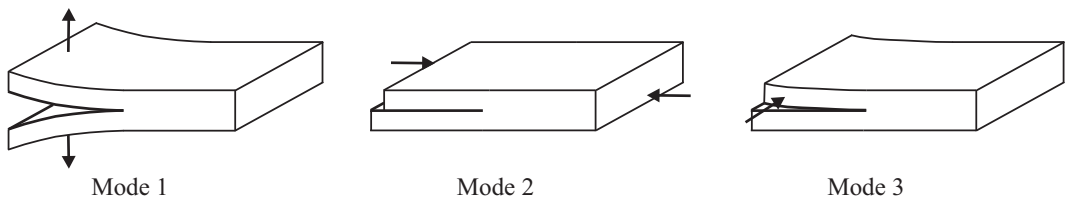


FIG. *5.1. Modes fondamentaux d'ouverture des fissures*

5.2 Contrainte critique théorique

Pour écarter les plans de clivage les uns des autres, la force à exercer est la dérivée par rapport au déplacement de l'énergie de cohésion. On considère que le clivage nécessite une dépense d'énergie qui correspond à la création de nouvelles surfaces, c'est-à-dire à $2\gamma_s$ par unité

d'aire clivée. A supposer que la variation de l'énergie de liaison en fonction de la distance entre plans réticulaires s'assimile à une sinusoïde, on trouve :

$$\sigma_c = \left(\frac{E\gamma_s}{b}\right)^{1/2} \tag{5.1}$$

où E est le module de Young et b le module du vecteur Burgers. En essayant avec les valeurs typiques : $E = 2 \cdot 10^{11}\text{N.m}^{-2}$,$b = 3 \cdot 10^{10}\text{m}$,$\gamma_s = 1$ J m^{-2}, la valeur de la contrainte critique est $\sigma_C = 2,6 \cdot 10^{10}\text{N.m}^{-2} \simeq E/10$.

Ce calcul donne une valeur bien plus élevée que les valeurs usuelles ($\simeq 10^9\text{N.m}^{-2}$ pour les aciers). Les trichites cependant présentent des contraintes de clivage de l'ordre de grandeur théorique, ce qui prouve la validité du calcul.

La différence s'explique par la présence de défauts géométriques ou d'inclusions qui créent une concentration de contrainte permettant d'atteindre localement cette contrainte théorique.

5.3 Lieu de rupture préférentiel

Les joints de grains, surface d'accolement de deux réseaux désorientés, possèdent une énergie de joint γ_j qui est fonction de cette désorientation. Lorsqu'une rupture se forme le long d'un tel joint, l'énergie de rupture des liaisons atomiques $2\gamma_S$ est donc diminuée de cette énergie de joint γ_j. Il devrait donc être plus aisé de créer des ruptures intergranulaires que des clivages transgranulaires. Mais il faut par ailleurs tenir compte d'une certaine anisotropie lors de l'évaluation de l'énergie de surface γ_S. Il est évident que celle d'un plan de clivage est la plus petite de toutes et qu'elle est en tous cas inférieure à celle d'une surface intergranulaire. On considère qu'elles sont dans un rapport 1,2. C'est donc le rapport de γ_j à $2\gamma_S$ du plan de clivage qui peut déterminer la préférence donnée à la rupture intergranulaire ou au clivage. La première est favorisée si R_{CI} est inférieur à 1 avec :

$$R_{CI} = \frac{2\gamma_{S\text{inter}} - \gamma_j}{2\gamma_{S\text{clivage}}} = 1,2 - \frac{\gamma_j}{2\gamma_{S\text{clivage}}} \tag{5.2}$$

Cottrell considère que γ_j est principalement relié au module de cisaillement μ, alors que γ_S dépend essentiellement du module de compressibilité k. R_{CI}, serait donc fonction du rapport μ/k.

Pour le fer ce rapport est 0,88. Ce calcul ne donne qu'une valeur idéale pour les joints de grain qui sont réductibles à de simples arrangements plans de dislocations. Mais, dans la réalité, au contraire, la structure des joints de grains est une structure de défauts complexe. De plus, ils sont responsables de la formation dans son voisinage d'une zone cristalline riche en défauts.

5.4 Nucléation

La naissance des clivages nécessite donc la présence de concentrations de contraintes. Celles-ci peuvent résulter de défauts géométriques (les petites indentations superficielles), d'hétérogénéité de déformation et notamment de la rupture des particules fragiles, de la décohésion inclusion-matrice.

5.4.1 Les défauts géométriques

La mécanique de la rupture montre que le facteur de concentration de contrainte à l'extrémité d'une entaille elliptique de grand axe a dans un champ de contrainte uniforme σ_{nom} vaut :

$$K_\sigma = \frac{\sigma_{\max}}{\sigma_{nom}} = 1 + 2\sqrt{\frac{a}{\rho}} \tag{5.3}$$

où ρ est le rayon de courbure à l'extrémité du grand axe. Si le rapport a/ρ est assez élevé, il est donc possible d'atteindre localement la contrainte théorique σ_C . La contrainte de rupture de la pièce contenant l'entaille sera donnée par :

$$\sigma_f \simeq \frac{1}{2}\sigma_C\sqrt{\frac{\rho}{a}} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{E\gamma_s\rho}{ab}} \tag{5.4}$$

Une représentation de l'évolution de σ_f en fonction de la distance à l'entaille est donnée sur la figure 5.2.

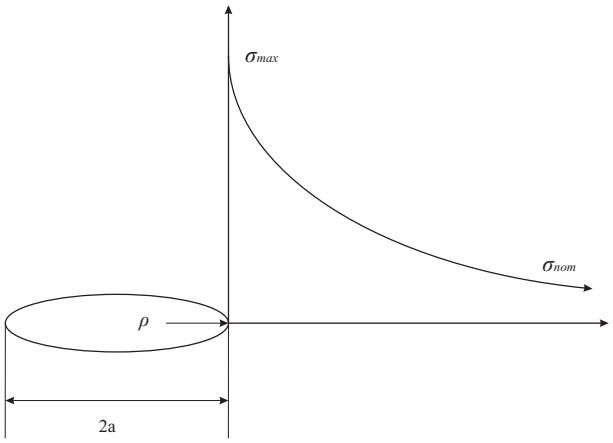


FIG. *5.2. Concentration de contrainte au voisinage d'une entaille elliptique soumise à une contrainte nominale uniforme*

5.4.2 Hétérogénéités de déformation

Une autre source essentielle de concentrations de contraintes génératrices de clivage est constituée par les hétérogénéités de déformation, c'est-à-dire les glissements hétérogènes ou les macles. En tête d'un empilement de n dislocations bloquées par un joint de grain [François et al., 1995], ou par une inclusion, il existe une concentration de contraintes. Cet empilement, dont la distance entre la source et l'extrémité est $d/2$, où d est la taille de grain représente sur la figure 5.3, peut être assimilé à une fissure traversante de longueur d dans un massif infini soumise à une contrainte de cisaillement effective $\tau - \tau_i$. En mécanique de la rupture, il est démontré que, pour une telle fissure, la contrainte normale au voisinage de son extrémité est donnée par :

$$\sigma = (\tau - \tau_i)\sqrt{\frac{d}{4r}} \cdot f(\theta) \tag{5.5}$$

où r et θ sont les coordonnées cylindriques par rapport à l'extrémité de l'empilement. Un clivage est supposé prendre alors naissance lorsque la contrainte théorique est atteinte sur une longueur r suffisante [François et al., 1995]. Alors, d'après la formule précédente :

$$\tau_f - \tau_i = \sigma_C \left(\frac{12b}{d}\right)^{1/2} f(\theta)^{-1} = \left(\frac{12E\gamma_s}{d}\right)^{1/2} f(\theta)^{-1} \tag{5.6}$$

Il apparaît une dépendance de la contrainte de naissance des clivages en $1/\sqrt{d}$.

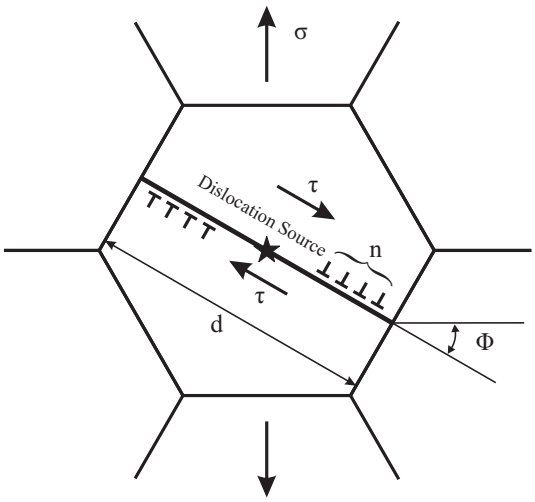


FIG. *5.3. Concentration de contrainte en tête d'un empilement de dislocations pouvant produire un clivage*

5.4.3 Rupture des carbures

Une source importante pour l'apparition de clivage dans les aciers est la présence de carbures. En effet, ceux-ci sont très fragiles, et des empilements de dislocations dans la ferrite sont susceptibles de créer les concentrations de contrainte nécessaires. D'après Smith [Smith, 1966], la condition correspondante est telle que :

$$\left(\frac{c_0}{d}\right)\sigma^2 + (\tau - \tau_i)^2 \left[1 + \left(\frac{c_0}{d}\right)^{1/2} \frac{4r_i}{\pi(\tau - \tau_i)}\right]^2 \geq \frac{4E\gamma_f}{\pi(1-\nu^2)\,d} \tag{5.7}$$

où c_0 est l'épaisseur des lamelles de cémentite, d la taille de grain de la ferrite (Fig.5.4). Les termes à gauche de l'expression précédente sont relatifs à la contrainte appliquée et traduisent d'une part son effet direct sur une fissure de longueur c_0 (premier terme) et d'autre part l'effet indirect de la concentration de contrainte par l'empilement (deuxième terme). Le membre de droite représente la résistance de la ferrite à la propagation du clivage.

D'après la relation de Petch, si on est à la limite d'élasticité, $\tau - \tau_i = k_y d^{-1/2}$ la formule de Smith donne :

$$c_0\sigma_f^2 + (k_y)^2 \left[1 + \frac{4r_i}{\pi(k_y)}\sqrt{c_0}\right]^2 = \frac{4E\gamma_f}{\pi(1-\nu^2)} \tag{5.8}$$

On constate que la contrainte de clivage varie en fonction de la taille de carbure.

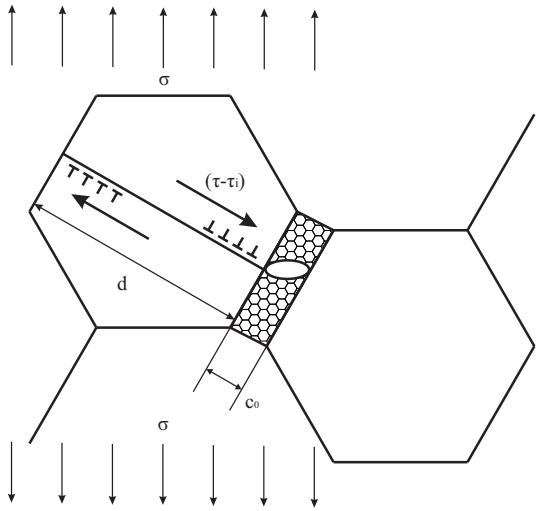
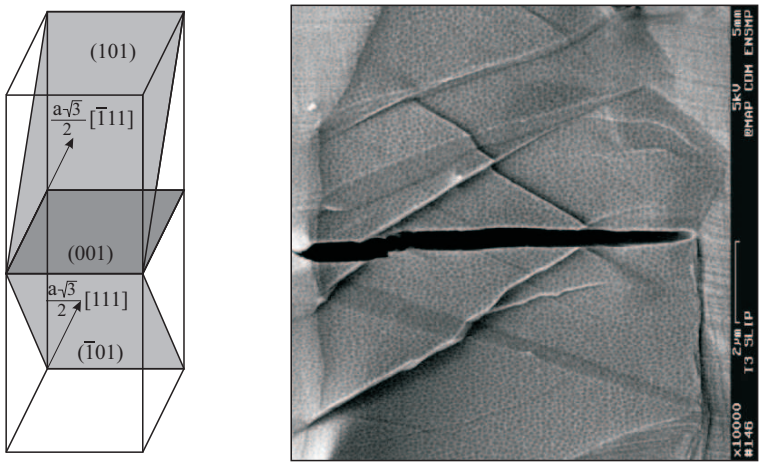


FIG. *5.4. Illustration du mécanisme de concentration de contrainte par rupture de carbure et empilement de dislocations*

5.4.4 Mécanisme de Cottrell

Comme le rappellent [François et al., 1995], Cottrell a proposé un modèle en vertu duquel l'autoblocage de deux glissements 110 dans les cubiques centrés peut induire un clivage sur un plan (100).



a) b)

FIG. *5.5. Mécanisme de Cottrell : apparition des clivages (100) dans les métaux cubiques centrés par autoblocage de deux glissements {110} [Cotrell, 1958]*

5.5 Propagation

La mécanique de la rupture montre que la contrainte σ_P qu'il faut appliquer pour que se propage une fissure circulaire de rayon a est donnée par :

$$\sigma_P = \frac{1}{2}\left[\frac{\pi E \gamma_R}{(1-\nu^2)\,a}\right]^{1/2} \tag{5.9}$$

Où E est le module d'Young, ν le coefficient de Poisson et γ_R l'énergie de rupture. Après nucléation, un clivage peut se propager sous une contrainte décroissante et, si le solide est sollicité à la force imposée, cette propagation est instable. Il faut toutefois tenir compte de deux phénomènes susceptibles de freiner cette propagation : la relaxation par glissement de dislocations et la traversée des joints de grain.

5.5.1 Relaxation par glissement de dislocations

Au voisinage de l'extrémité d'une fissure de clivage existe une forte concentration de contrainte qui est capable de faire glisser les dislocations, c'est-à-dire de produire des déformations plastiques. Celles-ci provoquent un émoussement de la fissure de clivage. Le glissement des dislocations consomme de l'énergie de déformation plastique γ_P qui vient s'ajouter à celle qu'il faut dépenser pour rompre les liaisons $2\gamma_S$. Donc, l'énergie de clivage est égale à $\gamma_P + 2\gamma_S$.

On a estimé que [François et al., 1995] :

$$\frac{\gamma_P}{2\gamma_S} = f(\gamma_S)\rho_D \frac{v_\mu}{v_C} >> 1 \tag{5.10}$$

où v_μ est la vitesse des dislocations sous la contrainte μ, v_C la vitesse de propagation de clivage, ρ_D la densité de dislocations mobiles, et où $f(\gamma_S)$ est une fonction de γ_S . On constate expérimentalement que l'énergie de rupture peut être jusqu'à mille fois plus élevée que l'énergie de surface.

La relation ci-dessus indique que toute variation de l'énergie de surface retentit automatiquement sur l'énergie totale de rupture, en amplifiant même fortement cette variation. La variation de la densité et de la mobilité de dislocations mobiles ont un rôle similaire.

5.5.2 Interaction avec les joints de grains

La désorientation du plan de clivage au passage d'un grain dans un autre se traduit par la formation de nombreuses marches sur la surface de rupture. De plus, la contrainte normale de clivage est certainement moins élevée dans le nouveau grain, sinon ce serait dans celui-ci que le clivage aurait pris naissance. Enfin, l'arrivée d'une fissure au voisinage d'un nouveau grain peut y déclencher des sources de dislocations et procurer de nouveaux modes de relaxation. Pour toutes ces raisons, la traversée d'un joint de grain constitue un obstacle qui se traduit par une augmentation de l'énergie de clivage.

Par application de la formule donnant la contrainte nécessaire à propagation (éq. 5.9) pour le cas a est égal d, la contrainte de franchissement du joint de grain σ_{jg} vaut :

$$\sigma_{jg} = \frac{1}{2}\left[\frac{\pi E \gamma_R}{(1-\nu^2)\,d}\right]^{1/2} \tag{5.11}$$

Cette contrainte critique peut dépasser celle qu'il faut appliquer pour la naissance du clivage. Dans ce cas, le clivage se bloque sur les joints et il devient possible d'observer des fissures qui se sont arrêtées sur des coupes micrographiques.

5.5.3 Contrainte critique

Revenant au le mécanisme de Cottrell, on note que la naissance du clivage n'est pas une condition suffisant à la rupture car il y a lieu d'examiner si le processus est énergétiquement possible. La variation d'énergie pour créer une fissure se compose de trois termes : l'énergie pour créer les surfaces, l'énergie pour monter les empilements des dislocations et l'énergie potentielle libérée. La condition d'instabilité de clivage s'exprime par le fait que la dérivée de la variation d'énergie est négative. Les calculs [François et al., 1995] montrent que :

$$\sigma_f \simeq \frac{\mu\gamma_S}{k_y d^{1/2}} \tag{5.12}$$

5.6 Approches locales statistiques

On peut trouver dans la litérature quelques modèles qui décrivent la rupture fragile par des critères généraux qui ne contiennent pas les informations détaillées tirées des champs de contrainte et déformation [Ritchie et al., 1973], [Chen et al., 1996], [Margolin et al., 1997a], [Margolin et al., 1997b]. Pour profiter des informations obtenues par simulation numérique, on présente ici les approches locales statistiques.

Les approches locales statistiques intègrent la dispersion des défauts dans les critères de rupture fragile. Les défauts à l'origine de la rupture présentent en effet une dispersion à la fois géographique dans le matériau et géométrique car ils sont généralement de formes et de tailles diverses.

5.6.1 Modèle de Weibull

Soit V un volume composé de N volumes élémentaires V_0. On fait les hypothèses suivantes :

- le matériau est statistiquement homogène, c'est-à-dire qu'il présente la même probabilité de comporter un défaut critique quelle que soit la position du volume V_0 observé ;
- la rupture d'un volume élémentaire V_0 par la présence d'un défaut critique, entraîne la ruine de toute la pièce.

Alors, la probabilité de rupture P_R du volume V s'exprime en fonction des probabilités élémentaires de rupture p_0 des volumes V_0. Plus directement, la probabilité de survie s'écrit :

$$1 - P_R = \prod_{r=1}^{N} (1 - p_r) \tag{5.13}$$

Le produit est transformé en somme en passant au logarithme, puis la somme discrète sur les N volumes V_0 est transformée en intégrale sur le volume V :

$$\ln(1 - P_R) = \frac{1}{V_0} \sum_{r=1}^{N} \ln(1 - p_r) \cdot V_0 \tag{5.14}$$

$$\ln(1 - P_R) = \frac{1}{V_0} \int_V \ln(1 - p_r) \cdot dV \tag{5.15}$$

La probabilité de rupture s'écrit alors :

$$P_R = 1 - \exp\left[-\frac{1}{V_0}\int_V \ln\left(\frac{1}{1-p_r}\right)\cdot dV\right] \tag{5.16}$$

En considérant que la probabilité locale de rupture p_r dépend de la contrainte σ, on introduit la fonction empirique de Weibull à quatre paramètres :

$$\ln\left(\frac{1}{1-p_r}\right) = \left(\frac{\sigma-\sigma_0}{\sigma_u}\right)^m \tag{5.17}$$

Donc :

$$P_R = 1 - \exp\left[-\frac{1}{V_0}\int_V \left(\frac{\sigma-\sigma_0}{\sigma_u}\right)^m \cdot dV\right] \tag{5.18}$$

où σ_0 représente la contrainte seuil, σ_u un facteur de normalisation et m le module de Weibull.

5.6.2 Modèle de Beremin

A partir de cette statistique de Weibull, le groupe de travail [Beremin, 1983] construit le modèle suivant :

- la contrainte seuil à considérer est nulle : $\sigma_0 = 0$;
- la contrainte σ est prise égale à la plus grande contrainte principale σ_I car elle pilote le clivage ;
- la rupture ne se produit que s'il y a déformation plastique locale. Le volume d'intégration V est pris égal au volume de la zone de localisation de la plasticité.

La probabilité de rupture de la pièce s'écrit alors :

$$P_R = 1 - \exp\left[-\frac{1}{V_P}\int_V \left(\frac{\sigma_I}{\sigma_u}\right)^m \cdot dV\right] \tag{5.19}$$

Soit :

$$P_R = 1 - \exp\left[-\left(\frac{\sigma_W}{\sigma_u}\right)^m\right] \tag{5.20}$$

où $\sigma_W = \int_{V_P} \sigma_I^m \frac{dV}{V_P}$ est appelée "contrainte de Weibull".

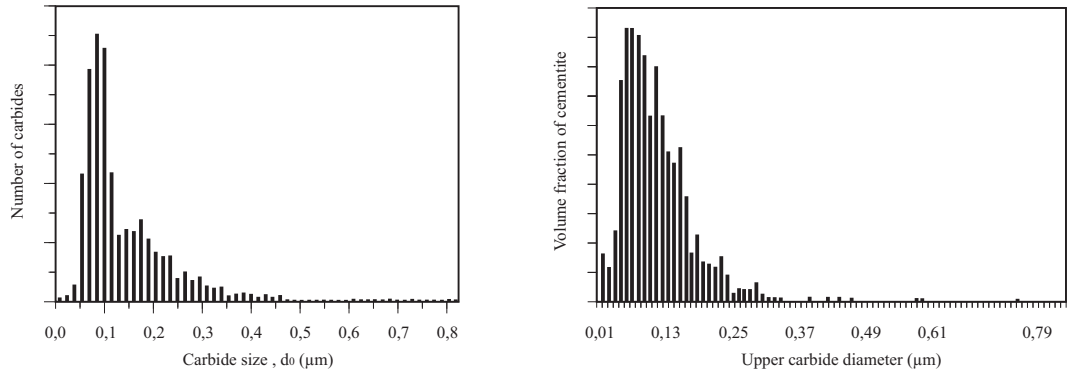


FIG. *5.6. Distributions de tailles de carbures déterminées expérimentalement pour deux nuances d'acier de cuve, d'après Lee et Ortner [Lee et al., 2002], [Ortner et al., 2005]*

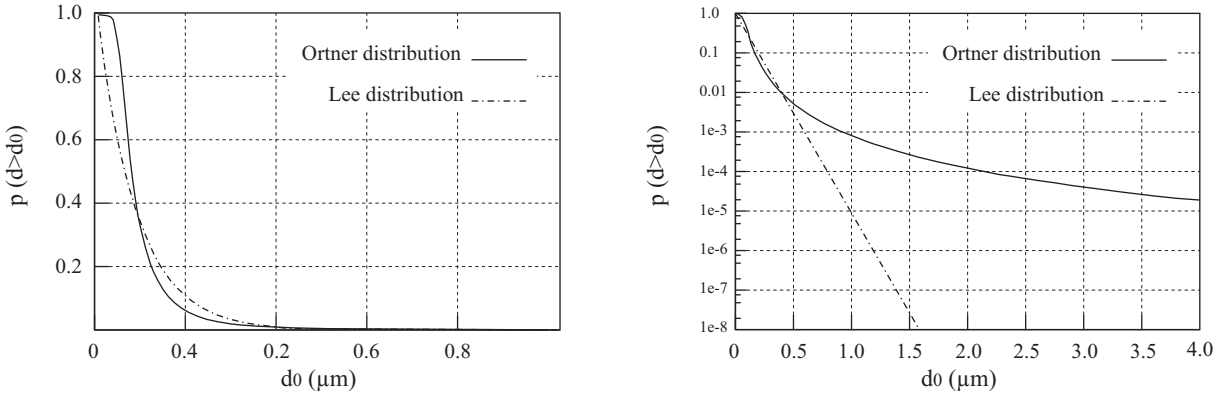


FIG. *5.7. Probabilité de trouver un carbure de taille plus grande que d_0 : échelle normale et échelle logarithme*

5.6.3 Distribution de carbure

La nucléation est principalement due à la rupture des carbures. Donc, la distribution des carbures est toujours prise en compte dans le calcul de la probabilité de rupture. Dans la littérature [Lee et al., 2002], [Ortner et al., 2005], on trouve les distributions de tailles de carbures des aciers A508 Cl.3, équivalent au 16MND5 (Fig. 5.6).

Lee et Ortner proposent les formules analytiques pour décrire les distributions trouvées (Fig.5.7) :

$$\text{Lee : } p\,(d > d_0) = \exp\left(-\left(\frac{d_0 - 0,00917}{0,10158}\right)^{1,192}\right)(\mu m) \tag{5.21}$$

$$\text{Ortner : } p\,(d > d_0) = 1 - \exp\left(-\left(\frac{d_{0/2}}{0,036}\right)^{-2,7}\right)(\mu m) \tag{5.22}$$

5.7 Effet de différents paramètres sur la rupture fragile

De nombreux paramètres affectent le mécanisme de la rupture fragile. Leur examen permet de montrer la nécessaire complexité qui en découle pour la modélisation.

Chargement. La vitesse de chargement ainsi que la triaxialité jouent un rôle important dans la propagation du clivage. Cet effet est étudié dans [Rice and Tracey, 1969], [Ma, 1998], [Kroon and Faleskog, 2005], [Machova and Beltz, 2004]. D'après Chen [Chen et al., 1996] la triaxialité a pour effet d'émousser les microfissures créées.

Température. Le rôle de la temperature sur la rupture fragile est complexe, et encore mal compris. En effet la température agit sur la plupart des phénomènes impliqués dans la rupture.

Premièrement, le comportement va dépendre de la température. Dans la plupart des modélisations, on traduit cela par un changement des paramètres de la loi de comportement [Margolin et al., 1999], [Tanguy et al., 2005a], [Yang et al., 2003], [Yang et al., 2004].

Par ailleurs, la température aura une influence sur les paramètres de rupture locaux : l'amorçage d'une micro-fissure sur un carbure, l'énergie de surface [Wallin et al., 1984], l'énergie d'ouverture de fissure, les barrières microstructurales telles que les joints de grains fortement désorientés.

Les défauts. La présence de gros défauts comme les amas de carbure ou MnS peut changer la contrainte critique de germination. D'après Mudry ([Mudry, 1982]), la décohésion d'un amas de carbure ou MnS est soumis au critère :

$$\sigma_R = \sigma_I + \lambda \left(\sigma_{eq} - \sigma_Y \right) \tag{5.23}$$

avec
- σ_I contrainte principale maximale ;
- σ_Y limite d'élasticité ;
- σ_{eq} contrainte équivalente de Von Mises ;
- λ facteur de forme.

Renevey ([Renevey, 1998]) considère que localement la contrainte critique est une contrainte nominale. La concentration de contrainte se traduit alors par une ténacité locale k_c :

$$k_c = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot \overline{\sigma}_c \cdot \sqrt{a_{MnS}} \tag{5.24}$$

où
- k_c est la ténacité locale ;
- $\overline{\sigma}_c$ est la contrainte critique ;
- a_{MnS} est la dimension de l'amas MnS.

Les autres défauts plus petits comme les solutés ou les défauts d'irradiation ont une influence indirecte, car ils diminuent la limite d'élasticité et la mobilité des dislocations.

5.8 Conclusion

Dans la plupart des matériaux de structure CC, la rupture par clivage est le mécanisme prédominant à basse température. Il commence par la nucléation, qui est le résultat des déformations locales ; ensuite la rupture apparaît quand la contrainte locale atteint la contrainte critique. Pour prévoir la rupture en relation avec les micromécanismes de déformation, des modèles d'approche locale sont développés. Dans cette approche, la distribution spatiale des particules fragiles, leur taille et leur forme doivent être prises en compte.

Dans ce travail, la rupture fragile est étudiée à l'échelle de la microstructure. On appliquera une "approche locale micromécanique". Les résultats sortant de nos simulations fourniront des informations sur le comportement à la rupture de l'élément de volume des modèles d'approche locale macroscopique de générations précédentes.

Deuxième partie

Implémentation et analyse des paramètres

Chapitre 6

Implémentation dans ZéBuLoN du modèle de Kock-Rauch

Nous avons implanté le modèle de comportement présenté en section 3.4 de la partie I dans le code `ZéBuLoN` [Besson and Foerch, 1998]. Ce logiciel a été retenu pour cette étude à cause de ses capacités de modélisation en non linéaire [Besson et al., 1998], des possibilités de modélisation de la plasticité de polycristaux à grande échelle [Barbe et al., 2001b], [Diard et al., 2005a], [Osipov et al., 2008a] et des outils de génération de microstructure hétérogène directement opérationnels [Osipov, 2007], [Osipov et al., 2008a], [Barbe et al., 2008].

Nous avons opéré dans deux cadres d'implémentation numérique : petite déformation et grande déformation. Chaque méthode a deux algorithmes d'intégration, intégration explicite et intégration implicite. Il y a donc quatre procédures de calcul, qui seront toutes présentées dans ce chapitre.

Dans chaque cas, nous avons trois types de variables à intégrer : le tenseur de déformation élastique $\underset{\sim}{\varepsilon}^e$ en petite déformation, ou $\underset{\sim}{\mathbf{E}}^e$ en grande déformation ; les glissements sur chaque système γ^s ; les densités des dislocations ρ^s. Les variables de densités des dislocations ρ^s seront remplacées par $r^s = \rho^s b^2$. Il y a deux raisons qui motivent ce changement de variable :

- les déformations élastiques $\underset{\sim}{\varepsilon}^e, \underset{\sim}{\mathbf{E}}^e$, et les glissements sur chaque système γ^s, sont des variables adimensionnelles. Il en est de même pour les variables $r^s = \rho^s b^2$ (puisque la densité de dislocations est donnée en m^{-2}). Ceci permet de rendre la procédure de calcul indépendante de la dimension.
- les valeurs des variables à intégrer ont le même ordre de grandeur après changement de variable, ce qui conduira à une matrice jacobienne mieux conditionnée.

$$\begin{pmatrix} \left[\dfrac{\partial R_E^k}{\partial E^e}\right] & \left[\dfrac{\partial R_E^k}{\partial \Delta\gamma}\right] & \left[\dfrac{\partial R_E^k}{\partial \Delta r}\right] \\ \left[\dfrac{\partial R_\gamma^k}{\partial E^e}\right] & \left[\dfrac{\partial R_\gamma^k}{\partial \Delta\gamma}\right] & \left[\dfrac{\partial R_\gamma^k}{\partial \Delta r}\right] \\ \left[\dfrac{\partial R_r^k}{\partial E^e}\right] & \left[\dfrac{\partial R_r^k}{\partial \Delta\gamma}\right] & \left[\dfrac{\partial R_r^k}{\partial \Delta r}\right] \end{pmatrix} \tag{6.1}$$

Après le changement de variable $r^s = \rho^s b^2$, la loi d'évolution de densité des dislocations devient :

$$\dot{r}^s = |\dot{\gamma}^s| \left(\frac{b}{D_{grain}} + \frac{\sqrt{\sum_{u \neq s} r^u}}{K(T)} - g_c(T) r^s \right) \tag{6.2}$$

6.1 Petites déformations

Dans l'approche en petites déformations, le tenseur de déformation totale est décomposé additivement en un tenseur de déformation élastique et un tenseur de déformation plastique. Ils sont symétriques.

$$\underset{\sim}{\varepsilon} = \underset{\sim}{\varepsilon}^e + \underset{\sim}{\varepsilon}^p \tag{6.3}$$

La tenseur du taux de déformation plastique est défini par la loi de Schmid. C'est la somme des contributions des glissements sur les systèmes :

$$\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^p = \sum_s \dot{\gamma}^s \underset{\sim}{\mathbf{m}}^s \tag{6.4}$$

où $\underset{\sim}{\mathbf{m}}^s = \frac{1}{2}\left(\underline{\mathbf{n}} \otimes \underline{\mathbf{l}} + \underline{\mathbf{l}} \otimes \underline{\mathbf{n}}\right)$ est le tenseur d'orientation, défini à partir de $\underline{\mathbf{n}}$, vecteur normal au plan de glissement, et $\underline{\mathbf{l}}$, qui donne la direction de glissement.

Le tenseur de contrainte de Cauchy est évalué à partir du tenseur de déformation élastique ($\underset{\sim}{\sigma} = \underset{\approx}{\mathbf{\Lambda}} : \underset{\sim}{\varepsilon}^e$) et permet de calculer la cission résolue, conformément à la loi de Schmid : $\tau^s = \underset{\sim}{\sigma} : \underset{\sim}{\mathbf{m}}^s$.

6.1.1 Intégration explicite

On suppose connues les valeurs des variables à l'instant t. L'algorithme nécessite d'évaluer les valeurs à l'instant $t + \Delta t$, en calculant pour cela $\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^e, \dot{r}^s$ et $\dot{\gamma}^s$. Ceci s'effectue au sein de la fonction `@Derivative`. On définit successivement :

1. le tenseur de contrainte
$$\underset{\sim}{\sigma} = \underset{\approx}{\mathbf{\Lambda}} : \underset{\sim}{\varepsilon}^e \tag{6.5}$$
2. la cission résolue
$$\tau^s = \underset{\sim}{\sigma} : \underset{\sim}{\mathbf{m}}^e_t \tag{6.6}$$
3. la cission interne de type forêt (éq 3.48)
$$\tau^s_{int} = \frac{(\mu b)^2 \sum_{u \neq s} a^{su} \rho^u}{\tau^s - \tau_0} \tag{6.7}$$
4. la cission effective (éq 3.46)
$$\tau_{eff} = \tau^s - \tau_0 - \tau^s_{int} \tag{6.8}$$
5. la vitesse de glissement (éq 3.44)
$$\dot{\gamma}^s = \dot{\gamma}_0 exp\left[-\frac{\Delta G_0}{k_B T}\left(1 - \left(\frac{|\tau^s_{eff}|}{\tau_R}\right)^p\right)^q\right] signe\left(\tau^s\right) \tag{6.9}$$
6. le taux de variation de la variable r (éq 3.51)
$$\dot{r}^s = |\dot{\gamma}^s| \left(\frac{b}{D_{grain}} + \frac{\sqrt{\sum_{u \neq s} r^u}}{K(T)} - g_c(T) r^s\right) \tag{6.10}$$

7. la vitesse de déformation plastique

$$\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^p_t = \sum_s \dot{\gamma}^s_t \underset{\sim}{\mathbf{m}}^s \tag{6.11}$$

L'appel à la fonction `Resolve_flux_grad` permet alors de résoudre le système mixte de pilotage en contrainte et déformation, ce qui permet de calculer $\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^e$ à partir des composantes connues de $\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}$, $\dot{\underset{\sim}{\sigma}}$ et de $\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^p$, soit :

$$\begin{pmatrix} \dot{\varepsilon}_{11} \\ \dot{\varepsilon}_{22} \\ \dot{\varepsilon}_{33} \\ \dot{\varepsilon}_{12} \\ \dot{\varepsilon}_{23} \\ \dot{\varepsilon}_{31} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dot{\varepsilon}^p_{11} \\ \dot{\varepsilon}^p_{22} \\ \dot{\varepsilon}^p_{33} \\ \dot{\varepsilon}^p_{12} \\ \dot{\varepsilon}^p_{23} \\ \dot{\varepsilon}^p_{31} \end{pmatrix} + \underset{\approx}{\mathbf{\Lambda}}^{-1} : \begin{pmatrix} \dot{\sigma}_{11} \\ \dot{\sigma}_{22} \\ \dot{\sigma}_{33} \\ \dot{\sigma}_{12} \\ \dot{\sigma}_{23} \\ \dot{\sigma}_{31} \end{pmatrix} \tag{6.12}$$

Il ne reste plus qu'à incrémenter les variables à intégrer :

$$\gamma^s_{t+\Delta t} = \gamma^s_t + \dot{\gamma}^s_t \Delta t \tag{6.13}$$
$$r^s_{t+\Delta t} = r^s_t + \dot{r}^s_t \Delta t \tag{6.14}$$
$$\underset{\sim}{\varepsilon}^e_{t+\Delta t} = \underset{\sim}{\varepsilon}^e_t + \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^e \Delta t \tag{6.15}$$

et à mettre à jour les variables auxiliaires, ce qui se fait dans la fonction `@StrainPart`, ainsi pour le tenseur de contrainte :

$$\underset{\sim}{\sigma}_{t+\Delta t} = \underset{\approx}{\mathbf{\Lambda}} : \underset{\sim}{\varepsilon}^e_{t+\Delta t}$$

6.1.2 Intégration implicite

Dans un schéma d'intégration implicite, l'incrément des variables à intégrer ne s'exprime pas seulement en fonction des variables à l'instant t. Ici, on évalue les incréments de variables critiques en s'appuyant sur une estimation à l'instant intermédiaire (point milieu généralisé) $t+\theta\Delta t$: $\Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^e = \Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^e(\underset{\sim}{\varepsilon}^e_\theta, \gamma^s_\theta, r^s_\theta)$, $\Delta\gamma^s = \Delta\gamma^s(\underset{\sim}{\varepsilon}^e_\theta, \gamma^s_\theta, r^s_\theta)$, $\Delta r^s = \Delta r^s(\underset{\sim}{\varepsilon}^e_\theta, \gamma^s_\theta, r^s_\theta)$, où $\underset{\sim}{\varepsilon}^e_\theta = \underset{\sim}{\varepsilon}^e_t + \theta\Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^e$, $\gamma^s_\theta = \gamma^s_t + \theta\Delta\gamma^s$, $r^s_\theta = r^s_t + \theta\Delta r^s$. Le système à considérer s'écrit :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^e & = \Delta\underset{\sim}{\varepsilon} - \Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^p = \Delta\underset{\sim}{\varepsilon} - \sum_s \Delta\gamma^s \underset{\sim}{\mathbf{N}}^s \\ \Delta\gamma^s & = \dot{\gamma}_0 \exp\left[-\dfrac{\Delta G_0}{k_B T} \left(1 - \left(\dfrac{|\tau^s_{eff}|}{\tau_R} \right)^p \right)^q \right] signe\left(\tau^s\right) \Delta t \quad (\textit{éq. } 3.44) \\ \Delta r^s & = |\Delta\gamma^s| \left(\dfrac{b}{D_{grain}} + \dfrac{\sqrt{\sum_{u\neq s} r^u_\theta}}{K(T)} - g_c(T) r^s_\theta \right) \quad (\textit{éq. } 3.51) \end{array} \right. \tag{6.16}$$

La résolution de ce système s'effectue à l'aide d'une méthode de Newton. On construit donc pour cela les vecteurs résidus suivants, dépendant de $\Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^e$, $\Delta\gamma^s$, Δr^s :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \mathcal{R}_e & = \Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^e - \Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^t - \sum_s \Delta\gamma^s \underset{\sim}{\mathbf{m}}^s signe(\tau^s_t) \\ \mathcal{R}_\gamma & = \Delta\gamma^s - \dot{\gamma}_0 \exp\left[-\dfrac{\Delta G_0}{k_B T} \left(1 - \left(\dfrac{|\tau^s_{eff}\left(\underset{\sim}{\varepsilon}^e + \theta\Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^e\right)|}{\tau_R} \right)^p \right)^q \right] signe\left(\tau^s\right) \Delta t \\ \mathcal{R}_r & = \Delta r^s - |\Delta\gamma^s| \left(\dfrac{b}{D_{grain}} + \dfrac{\sqrt{\sum_{u\neq s} \left(r^u_t + \theta\Delta r^u\right)}}{K(T)} - g_c(T)\left(r^s_t + \theta\Delta r^s\right) \right) \end{array} \right. \tag{6.17}$$

La méthode impose de calculer les dérivés partielles des résidus par rapport aux variables intégrées.

Nous obtenons les valeurs des $\Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^{\mathbf{e}}$, $\Delta\gamma$ et Δr à l'instant $(t+\Delta t)$ pour l'itération de calcul $k+1$ comme :

$$\begin{pmatrix} \Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^{k+1} \\ \Delta\gamma^{k+1} \\ \Delta r^{k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^{k} \\ \Delta\gamma^{k} \\ \Delta r^{k} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \left[\dfrac{\partial R_e^k}{\partial \Delta\varepsilon^e}\right] & \left[\dfrac{\partial R_e^k}{\partial \Delta\gamma}\right] & \left[\dfrac{\partial R_e^k}{\partial \Delta r}\right] \\ \left[\dfrac{\partial R_\gamma^k}{\partial \Delta\varepsilon^e}\right] & \left[\dfrac{\partial R_\gamma^k}{\partial \Delta\gamma}\right] & \left[\dfrac{\partial R_\gamma^k}{\partial \Delta r}\right] \\ \left[\dfrac{\partial R_r^k}{\partial \Delta\varepsilon^e}\right] & \left[\dfrac{\partial R_r^k}{\partial \Delta\gamma}\right] & \left[\dfrac{\partial R_r^k}{\partial \Delta r}\right] \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \mathcal{R}_{\underset{\sim}{\varepsilon}}^k \\ \mathcal{R}_\gamma^k \\ R_r^k \end{pmatrix} \tag{6.18}$$

Après convergence, nous obtenons les valeurs des $\Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^{\mathbf{e}}$, $\Delta\gamma$ et Δr. Notons qu'il est également possible d'éliminer les variables r^s, car leur incréments s'expriment de façon explicite en fonction de ceux de γ^s. Cette solution a été étudiée. Elle diminue le nombre de variables (un tenseur et un vecteur de la dimension N, nombre de systèmes de glissement, au lieu d'un tenseur et deux vecteurs de dimensions N). Cependant, les équations à traiter sont plus complexes, si bien que les itérations sont plus nombreuses, et que le gain n'est pas notable.

La mise à jour des variables auxiliaires s'effectue de la même façon que précédemment.

6.2 Grandes déformations

Il est raisonnable d'utiliser le cadre de travail des grandes déformations au-delà de 5% de déformation, en raison notamment de la rotation des plans cristallins. Lorsqu'on applique 10% de déformation moyenne sur un agrégat, ce qui est notre objectif, les déformations locales peuvent atteindre facilement le double. Il est donc nécessaire d'utiliser ce formalisme pour obtenir une bonne définition des champs de contrainte au voisinage de la rupture.

6.2.1 Notations

On utilise les notations suivantes :
- Coordonnées initiales : $\underline{\mathbf{X}}$
- Coordonnées actuelles : $\underline{\mathbf{x}}$
- Tenseur gradient de la transformation : $\underset{\sim}{\mathbf{F}} = \frac{\partial \underline{\mathbf{x}}}{\partial \underline{\mathbf{X}}}$
- Changement de volume : $J = det(\underset{\sim}{\mathbf{F}})$
- Tenseur de dilatations (Cauchy-Green droit) : $\underset{\sim}{\mathbf{C}} = \underset{\sim}{\mathbf{F}}\underset{\sim}{\mathbf{F}}^T$
- Tenseur gradient de vitesse : $\underset{\sim}{\mathbf{L}} = \mathbf{grad}\,\underline{\mathbf{v}} = \dot{\underset{\sim}{\mathbf{F}}}\underset{\sim}{\mathbf{F}}^{-1}$
- Tenseur de contrainte de Cauchy : $\underset{\sim}{\sigma}$
- Tenseur de contrainte de Piola-Kirchhoff II : $\underset{\sim}{\mathbf{S}}^e$
- En cas de plasticité, décomposition multiplicative au niveau du tenseur gradient $\underset{\sim}{\mathbf{F}}$:

$$\underset{\sim}{\mathbf{F}} = \underset{\sim}{\mathbf{F}}^e\underset{\sim}{\mathbf{F}}^p \tag{6.19}$$

– La dérivée du tenseur gradient et le tenseur gradient de vitesse s'expriment dans ces conditions :

$$\dot{\underset{\sim}{\mathbf{F}}} = \dot{\underset{\sim}{\mathbf{F}}}^e \underset{\sim}{\mathbf{F}}^p + \underset{\sim}{\mathbf{F}}^e \dot{\underset{\sim}{\mathbf{F}}}^p \tag{6.20}$$

$$\underset{\sim}{\mathbf{L}} = \dot{\underset{\sim}{\mathbf{F}}} \underset{\sim}{\mathbf{F}}^{-1} = \dot{\underset{\sim}{\mathbf{F}}}^e \underset{\sim}{\mathbf{F}}^p \underset{\sim}{\mathbf{F}}^{p-1} \underset{\sim}{\mathbf{F}}^{e-1} + \underset{\sim}{\mathbf{F}}^e \dot{\underset{\sim}{\mathbf{F}}}^p \underset{\sim}{\mathbf{F}}^{p-1} \underset{\sim}{\mathbf{F}}^{e-1} \tag{6.21}$$

$$\underset{\sim}{\mathbf{L}} = \dot{\underset{\sim}{\mathbf{F}}}^e \underset{\sim}{\mathbf{F}}^{e-1} + \underset{\sim}{\mathbf{F}}^e \dot{\underset{\sim}{\mathbf{F}}}^p \underset{\sim}{\mathbf{F}}^{p-1} \underset{\sim}{\mathbf{F}}^{e-1} \tag{6.22}$$

$$\underset{\sim}{\mathbf{L}} = \underset{\sim}{\mathbf{L}}^e + \underset{\sim}{\mathbf{F}}^e \underset{\sim}{\mathbf{L}}^p \underset{\sim}{\mathbf{F}}^{e-1} \tag{6.23}$$

– On considère un comportement hyper-élastique construit à partir d'une mesure de déformation lagrangienne :

$$\underset{\sim}{\mathbf{E}}^e = \frac{1}{2}\left(\underset{\sim}{\mathbf{F}}^{eT} \underset{\sim}{\mathbf{F}}^e - \underset{\sim}{\mathbf{I}}\right) \tag{6.24}$$

– L'écoulement plastique cristallin est obtenu comme la somme des contributions des systèmes de glissement $\underset{\sim}{\mathbf{N}}_0^s$ (s indice du système de glissement, 0 indiquant la configuration relaxée) :

$$\underset{\sim}{\mathbf{L}}^p = \sum_{s=1}^{N} \dot{\gamma}^s \underset{\sim}{\mathbf{N}}_0^s \tag{6.25}$$

– Le tenseur $\underset{\sim}{\mathbf{N}}_0^s$, pour un système de glissement de direction $\underline{\mathbf{l}}_0$ dans le plan de normale $\underline{\mathbf{n}}_0$, est défini par :

$$\underset{\sim}{\mathbf{N}}_0^s = \underline{\mathbf{l}}_0^s \otimes \underline{\mathbf{n}}_0^s \tag{6.26}$$

– Par définition :

$$\dot{\underset{\sim}{\mathbf{F}}}^p \underset{\sim}{\mathbf{F}}^p = \underset{\sim}{\mathbf{L}}^p \tag{6.27}$$

– L'intégration de l'équation ci-dessus donne :

$$\underset{\sim}{\mathbf{F}}^p_{n+1} = \exp(\underset{\sim}{\mathbf{L}}^p \Delta t) \underset{\sim}{\mathbf{F}}^p_n = \exp(\sum_{s=1}^{N} \Delta\gamma \underset{\sim}{\mathbf{N}}_0^s \underset{\sim}{\mathbf{F}}^p_n) \tag{6.28}$$

– Comme on le justifie en annexeD.1, la cission résolue s'exprime comme :

$$\tau^s = \underset{\sim}{\mathbf{S}}^e : \underset{\sim}{\mathbf{N}}_0^s = \left(\underset{\approx}{\mathbf{\Lambda}} : \underset{\sim}{\mathbf{E}}^e\right) : \underset{\sim}{\mathbf{N}}_0^s \tag{6.29}$$

6.2.2 Intégration explicite

A partir des valeurs de variables $\underset{\sim}{\mathbf{E}}^e\, \gamma^s\, r^s$ à l'instant t, nous allons calculer les valeurs de variables à l'instant $t + \Delta t$. Le travail s'effectue dans la procédure `@Derivative`, en calculant successivement :

1. la contrainte de Piola-Kirchhoff II :

$$\underset{\sim}{\mathbf{S}}^e_t = \underset{\approx}{\mathbf{\Lambda}} : \underset{\sim}{\mathbf{E}}^e_t \tag{6.30}$$

2. la cission résolue :

$$\tau^s_t = \underset{\sim}{\mathbf{S}}^e : \underset{\sim}{\mathbf{N}}_0^s \tag{6.31}$$

3. la cission interne (éq. 3.48) :

$$\tau^s_{inter(t)} = \frac{\mu^2 \sum_u a^{su} r^u_t}{\tau^s_t - \tau_0} \tag{6.32}$$

4. la cission effective (éq. 3.46) :

$$\tau^s_{eff(t)} = \tau^s_t - \tau_0 - \tau^s_{inter(t)} \tag{6.33}$$

5. les variables γ^s (éq. 3.44) :

$$\gamma^s_{t+\Delta t} = \gamma^s_t + \dot{\gamma}_0 \exp\left(-\frac{\Delta G_0}{kT}\left(1 - \left(\frac{\tau^s_{eff(t)}}{\tau_R}\right)^p\right)^q\right)\Delta t \tag{6.34}$$

6. les variables r (éq. 3.51) :

$$r^s_{t+\Delta t} = r^s_t + |\dot{\gamma}^s_t|\left(\frac{b}{d} + \frac{\sqrt{\sum_{u\neq s} r^u_t}}{K} - \frac{g_c r^s_t}{b}\right)\Delta t \tag{6.35}$$

7. le tenseur gradient de transformation plastique :

$$\underset{\sim}{\mathbf{F}}^p_{t+\Delta t} = \exp(\underset{\sim}{\mathbf{L}}^p \Delta t)\underset{\sim}{\mathbf{F}}^p_t = \exp(\sum_{s=1}^{N} \Delta\gamma \underset{\sim}{\mathbf{N}}^s_0 \underset{\sim}{\mathbf{F}}^p_t) \tag{6.36}$$

8. le tenseur gradient de transformation élastique :

$$\underset{\sim}{\mathbf{F}}^e_{t+\Delta t} = \underset{\sim}{\mathbf{F}}_{t+\Delta t}\underset{\sim}{\mathbf{F}}^{p-1}_{t+\Delta t} \tag{6.37}$$

le tenseur de Green-Lagrange :

$$\underset{\sim}{\mathbf{E}}^e_{t+\Delta t} = \frac{1}{2}\left(\underset{\sim}{\mathbf{F}}^{eT}_{t+\Delta t}\underset{\sim}{\mathbf{F}}^e_{t+\Delta t} - \underset{\sim}{\mathbf{I}}\right) \tag{6.38}$$

On met ensuite à jour les variables auxiliaires dans `@StrainPart` :

$$\underset{\sim}{\mathbf{S}}^e_{t+\Delta t} = \underset{\sim\sim}{\mathbf{\Lambda}} : \underset{\sim}{\mathbf{E}}^e_{t+\Delta t} \tag{6.39}$$

$$\underset{\sim}{\mathbf{F}}^p_{t+\Delta t} = \exp(\underset{\sim}{\mathbf{L}}^p \Delta t)\underset{\sim}{\mathbf{F}}^p_t = \exp(\sum_{s=1}^{N} \Delta\gamma \underset{\sim}{\mathbf{N}}^s_0)\underset{\sim}{\mathbf{F}}^p_t \tag{6.40}$$

$$\underset{\sim}{\mathbf{F}}^e_{t+\Delta t} = \underset{\sim}{\mathbf{F}}_{t+\Delta t}\underset{\sim}{\mathbf{F}}^{p-1}_{t+\Delta t} \tag{6.41}$$

$$\underset{\sim}{\sigma}_{t+\Delta t} = (1/J)\,\underset{\sim}{\mathbf{F}}^e_{t+\Delta t}\underset{\sim}{\mathbf{S}}^e_{t+\Delta t}\underset{\sim}{\mathbf{F}}^{eT}_{t+\Delta t} \tag{6.42}$$

6.2.3 Intégration implicite

Rappelons que les variables à intégrer sont $\underset{\sim}{\mathbf{E}}^e$, γ^s, r^s. Pour utiliser méthode de Newton, il nous faut construire les fonctions résidus. D'après les équations 3.44 et 3.51, nous avons :

$$\begin{cases} \Delta\gamma^s & = \dot{\gamma}_0 exp\left[-\dfrac{\Delta G_0}{k_B T}\left(1 - \left(\dfrac{|\tau^s_{eff}\left(\Delta\underset{\sim}{\mathbf{E}}^e_\theta\right)|}{\tau_R}\right)^p\right)^q\right] signe\left(\tau^s\right).\Delta t \\ \Delta r^s & = |\Delta\gamma^s|\left(\dfrac{b}{D_{grain}} + \dfrac{\sqrt{\sum_{u\neq s}\left(r^u_t + \theta\Delta r^u\right)}}{K(T)} - g_c(T)\left(r^s_t + \theta\Delta r^s\right)\right) \end{cases} \tag{6.43}$$

ce qui donne les résidus suivants :

$$\left\{\begin{array}{ll} \mathcal{R}_\gamma & = \Delta\gamma^s - \dot{\gamma}_0 exp\left[-\dfrac{\Delta G_0}{k_B T}\left(1-\left(\dfrac{|\tau^s_{eff}\left(\Delta\underset{\sim}{\mathbf{E}}^e\right)|}{\tau_R}\right)^p\right)^q\right] signe\left(\tau^s\right).\Delta t \\ \mathcal{R}_r & = \Delta r^s - |\Delta\gamma^s|\left(\dfrac{b}{D_{grain}} + \dfrac{\sqrt{\sum_{u\neq s}\left(r^u_t + \Delta r^u\right)}}{K(T)} - g_c(T)\left(r^s_t + \Delta r^s\right)\right) \end{array}\right. \tag{6.44}$$

Il faut également construire les fonctions résidus de $\underset{\sim}{\mathbf{E}}^e$. On introduit pour cela un tenseur d'essai $\underset{\sim}{\mathbf{F}}^*$, calculé en supposant l'incrément élastique, $\underset{\sim}{\mathbf{F}}^* = \underset{\sim}{\mathbf{F}}_{n+1}\underset{\sim}{\mathbf{F}}^{p-1}_n$. Il vient alors :

$$\underset{\sim}{\mathbf{F}}^* = \underset{\sim}{\mathbf{F}}^e_{t+\Delta t}\underset{\sim}{\mathbf{F}}^p_{t+\Delta t}\underset{\sim}{\mathbf{F}}^{p-1}_t = \underset{\sim}{\mathbf{F}}^e_{t+\Delta t}\exp(\sum_{s=1}^{N}\Delta\gamma^s\underset{\sim}{\mathbf{N}}^s_0)$$

$$\underset{\sim}{\mathbf{F}}^* \approx \underset{\sim}{\mathbf{F}}^e_{t+\Delta t}(\underset{\sim}{\mathbf{I}} + \Delta\gamma^s\underset{\sim}{\mathbf{N}}^s_0)$$

$$\underset{\sim}{\mathbf{F}}^{*T}\underset{\sim}{\mathbf{F}}^* \approx (\underset{\sim}{\mathbf{I}} + \Delta\gamma^s\underset{\sim}{\mathbf{N}}^{sT}_0)\underset{\sim}{\mathbf{F}}^{eT}_{t+\Delta t}\underset{\sim}{\mathbf{F}}^e_{t+\Delta t}(\underset{\sim}{\mathbf{I}} + \Delta\gamma^s\underset{\sim}{\mathbf{N}}^s_0)$$

$$\underset{\sim}{\mathbf{F}}^{*T}\underset{\sim}{\mathbf{F}}^* \approx \underset{\sim}{\mathbf{F}}^{eT}_{t+\Delta t}\underset{\sim}{\mathbf{F}}^e_{t+\Delta t} + 2\sum_{s=1}^{N}\Delta\gamma^s\left\{\underset{\sim}{\mathbf{N}}^s_0\underset{\sim}{\mathbf{C}}^e_{t+\Delta t}\right\}$$

On obtient le résidu après avoir calculé la déformation lagrangienne :

$$\underset{\sim}{\mathbf{E}}^* = \underset{\sim}{\mathbf{E}}^e + \sum_{s=1}^{N}\Delta\gamma^s\left\{\underset{\sim}{\mathbf{N}}^s\underset{\sim}{\mathbf{C}}^e_{t+\Delta t}\right\}$$

$$\mathcal{R}_{\underset{\sim}{\mathbf{E}}^e} = \underset{\sim}{\mathbf{E}}^e - \underset{\sim}{\mathbf{E}}^* + \sum_{s=1}^{N}\Delta\gamma^s\left\{\underset{\sim}{\mathbf{N}}^s\underset{\sim}{\mathbf{C}}^e_{t+\Delta t}\right\}$$

La procédure de calcul s'initialise dans `@PreStep` par le calcul de la déformation d'essai :

$$\underset{\sim}{\mathbf{F}}^* = \underset{\sim}{\mathbf{F}}_{t+\Delta t}\underset{\sim}{\mathbf{F}}^{p-1}_t$$

$$\underset{\sim}{\mathbf{E}}^* = \frac{1}{2}\left(\underset{\sim}{\mathbf{F}}^{*T}\underset{\sim}{\mathbf{F}}^* - \underset{\sim}{\mathbf{I}}\right)$$

C'est ensuite la fonction `@CalcGradF` qui permet d'effectuer les itérations de la méthode de Newton. On y évalue successivement la contrainte de Piola-Kirchhoff II, la cission résolue, la cission interne ((éq. 3.48), la cission effective (éq. 3.46), le tenseur gradient de transformation plastique, le tenseur gradient de transformation élastique et le tenseur de Cauchy-Green. Ces variables permettent de former les résidus :

$$\left\{\begin{array}{ll} \mathcal{R}_{E^e} & = \underset{\sim}{\mathbf{E}}^e - \underset{\sim}{\mathbf{E}}^* + \sum\limits_{s=1}^{N}\Delta\gamma^s\left\{\underset{\sim}{\mathbf{N}}^s\underset{\sim}{\mathbf{C}}^e_{k+1}\right\} \\ \mathcal{R}_\gamma & = \Delta\gamma^s_k - \dot{\gamma}_0 exp\left[-\dfrac{\Delta G_0}{k_B T}\left(1-\left(\dfrac{|\tau^s_{eff}\left(\Delta\underset{\sim}{\mathbf{E}}^e\right)|}{\tau_R}\right)^p\right)^q\right] signe\left(\tau^s\right).\Delta t \\ \mathcal{R}_r & = \Delta r^s_k - |\Delta\gamma^s|\left(\dfrac{b}{D_{grain}} + \dfrac{\sqrt{\sum_{u\neq s}\left(r^u_t + \Delta r^u\right)}}{K(T)} - g_c(T)\left(r^s_t + \Delta r^s\right)\right) \end{array}\right. \tag{6.45}$$

Les valeurs des $\Delta\underset{\sim}{\mathbf{E}}^{\mathbf{e}}$, $\Delta\gamma$ et Δr à la $k+1$ ième d'itération de calcul sont :

$$\begin{pmatrix} \Delta\underset{\sim}{\mathbf{E}}_{k+1} \\ \Delta\gamma_{k+1} \\ \Delta r_{k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Delta\underset{\sim}{\mathbf{E}}_{k} \\ \Delta\gamma_{k} \\ \Delta r_{k} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \left[\frac{\partial R_E^k}{\partial E}\right] & \left[\frac{\partial R_E^k}{\partial \Delta\gamma}\right] & \left[\frac{\partial R_E^k}{\partial \Delta r}\right] \\ \left[\frac{\partial R_\gamma^k}{\partial E}\right] & \left[\frac{\partial R_\gamma^k}{\partial \Delta\gamma}\right] & \left[\frac{\partial R_\gamma^k}{\partial \Delta r}\right] \\ \left[\frac{\partial R_r^k}{\partial E}\right] & \left[\frac{\partial R_r^k}{\partial \Delta\gamma}\right] & \left[\frac{\partial R_r^k}{\partial \Delta r}\right] \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \mathcal{R}^k_{\underset{\sim}{\mathbf{E}}} \\ \mathcal{R}^k_{\gamma} \\ R^k_r \end{pmatrix} \tag{6.46}$$

Après convergence on obtient les valeurs des $\Delta\underset{\sim}{\mathbf{E}}^e$, $\Delta\gamma$ et Δr à l'instant $t+\Delta t$, on met à jour les variables auxiliaires dans `@StrainPart` :

$$\underset{\sim}{\mathbf{S}}^e_{t+\Delta t} = \underset{\approx}{\mathbf{\Lambda}} : \underset{\sim}{\mathbf{E}}^e_{t+\Delta t} \tag{6.47}$$

$$\underset{\sim}{\mathbf{F}}^p_{t+\Delta t} = \exp(\underset{\sim}{\mathbf{L}}^p \Delta t)\underset{\sim}{\mathbf{F}}^p_t = \exp(\sum_{s=1}^{N} \Delta\gamma \underset{\sim}{\mathbf{N}}^s_0)\underset{\sim}{\mathbf{F}}^p_t \tag{6.48}$$

$$\underset{\sim}{\mathbf{F}}^e_{t+\Delta t} = \underset{\sim}{\mathbf{F}}_{t+\Delta t}\underset{\sim}{\mathbf{F}}^{p-1}_{t+\Delta t} \tag{6.49}$$

$$\underset{\sim}{\sigma}_{t+\Delta t} = (1/J)\,\underset{\sim}{\mathbf{F}}^e_{t+\Delta t}\underset{\sim}{\mathbf{S}}^e_{t+\Delta t}\underset{\sim}{\mathbf{F}}^{eT}_{t+\Delta t} \tag{6.50}$$

6.3 Tests simples

Après avoir implémenté le modèle présenté en section 3.4 de la Partie I dans l'environnement de `ZéBuLon`, on va effectuer des tests sur un point de Gauss et sur des agrégats simples.

6.3.1 Test sur un point de Gauss

Le test se réfère à une simulation existante [Diard and Vincent, 2006] en petites déformations, qui a été implémentée dans l'environnement `Zmat` de `ZéBuLon`. Dans la suite, les résultats apparentés à `Zmat` fournissent les références, tandis que ceux qui sont apparentés à `ZéBuLoN` sont le fruit de l'implémentation de cette étude. Les paramètres du modèle figurent dans le tableau 6.1 et la condition de chargement est dans le tableau 6.3. Les résultats sont reportés sur les figures 6.1 à 6.3. Ils permettent de valider notre implémentation.

$C11$ (GPa)	$C12$ (GPa)	$C44$ (GPa)	$\dot{\gamma}_0$ (s^{-1})	τ_0 (MPa)	T (K)	b (m)	a_{su}
$275,2$	$112,4$	$81,4$	10^6	132	298	$2,514 \times 10^{-10}$	$0,25$
K	g_c (m)	$r_i, i : 1..24$	d (m)	ΔG_0 (eV)	τ_R (MPa)	p	q
$22,9$	8×10^{-9}	$6,320196 \times 10^{-8}$	10^{-5}	$0,77$	498	$0,335$	$1,12$

TAB. *6.1. Les paramètres pour les simulations dans Zmat et ZéBuLoN*

Orientation cristalline			
X1	1.	0.	0.
X3	0.	0.	1.

TAB. *6.2. Orientation cristalline*

Temps (s)	σ_{11} (MPa)	σ_{22} (MPa)	ε_{33}	σ_{12} (MPa)	σ_{23} (MPa)	σ_{31} (MPa)
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
400.0	0.0	0.0	0.2	0.0	0.0	0.0

TAB. *6.3. Conditions de chargement*

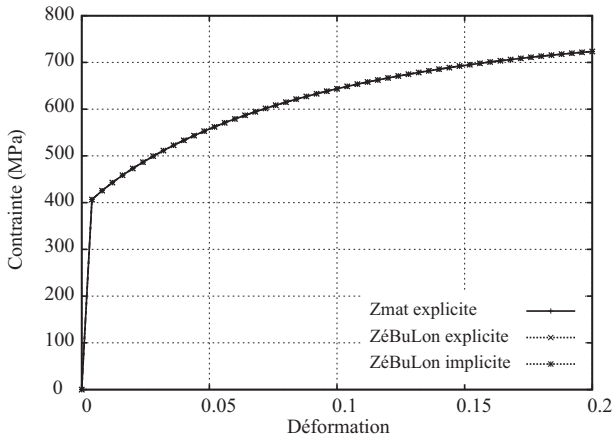


FIG. 6.1. *Courbe contrainte–déformation dans la direction de traction. Comparaison entre Zmat et ZéBuLoN*

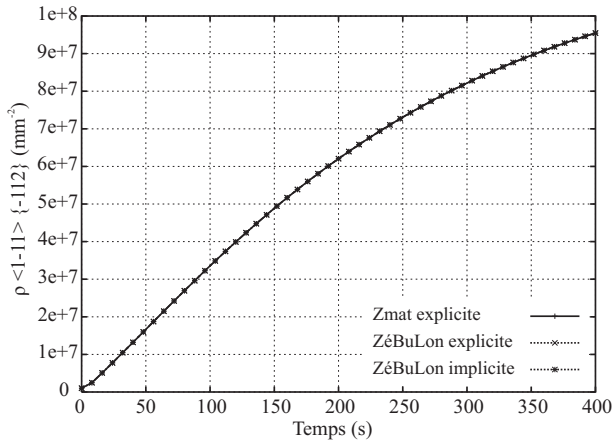


FIG. 6.2. *Densité de dislocations sur le système* $< 1\bar{1}1 > \{\bar{1}12\}$. *Comparaison entre Zmat et ZéBuLoN*

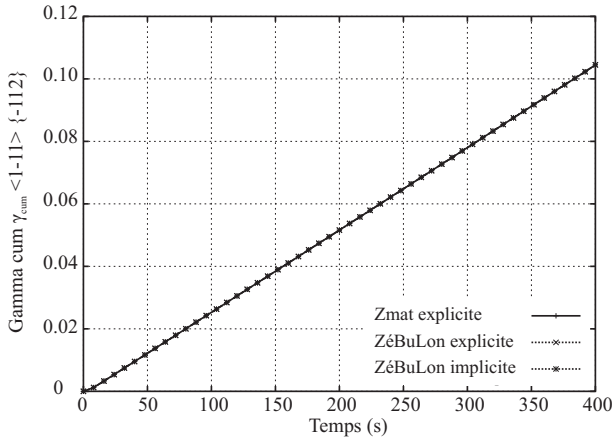
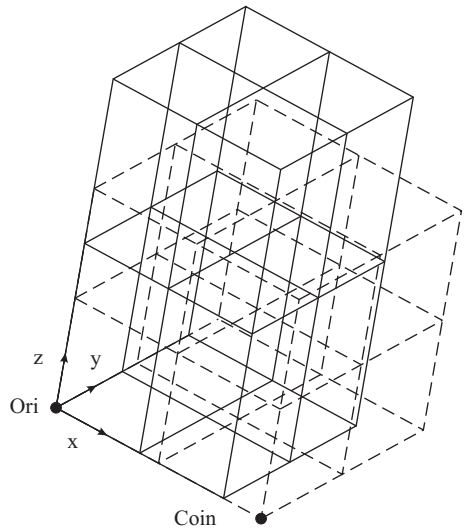


FIG. 6.3. *Glissement cumulé sur le système* $< 1\bar{1}1 > \{\bar{1}12\}$. *Comparaison entre Zmat et ZéBuLoN*

6.3.2 Test avec un maillage élémentaire

Des tests de traction simple et cisaillement simple sont effectués sur un monocristal avec 8 éléments de types C3D20 (éléments à 20 nœuds à intégration complète, soit 81 nœuds et 216 points d'intégration au total).

Traction simple. Les données du calcul sont définies par la figure 6.4, et les résultats sur la figure 6.5. On observe que les niveau de contrainte obtenus en petite déformation et en grande déformation sont très différents quand la déformation dépasse 5%.



Agrégat :
- *8 élément C3D20*
- *81 nœuds*
- *243 Dof*
- *Paramètres matériau du tableau 6.1*

Condition du chargement :
- *Ori U1 0. ; U2 0. ; U3 0.*
- *Coin U2 0. ; U3 0.*

Temps	*U3 du Plan (z=0)*	*U3 du Plan (z=1)*
0.	*0.*	*0.*
400.	*0.*	*0.5*

Orientation cristalline			
X1	*1.*	*0.*	*0.*
X3	*0.*	*0.*	*1.*

FIG. *6.4. Etats initial et déformé*

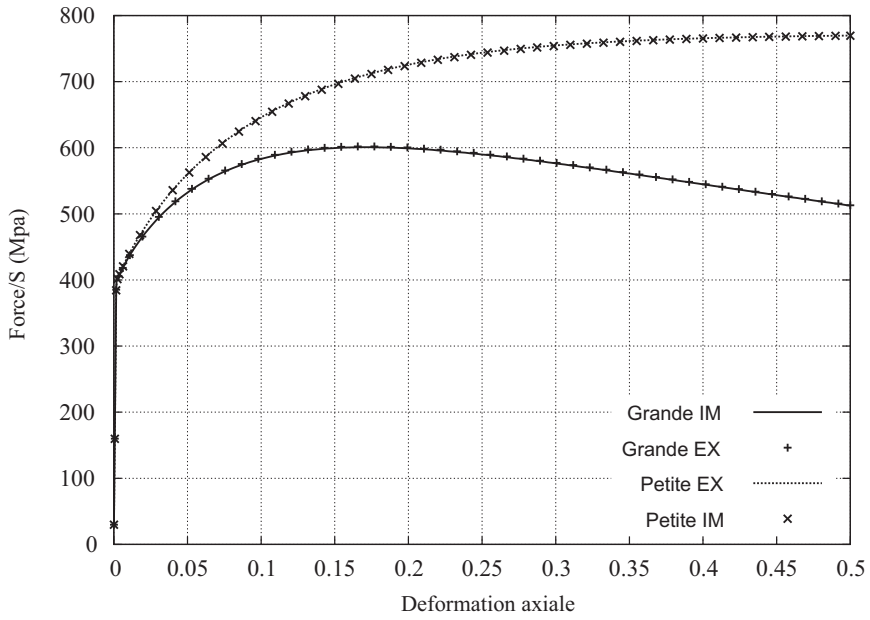
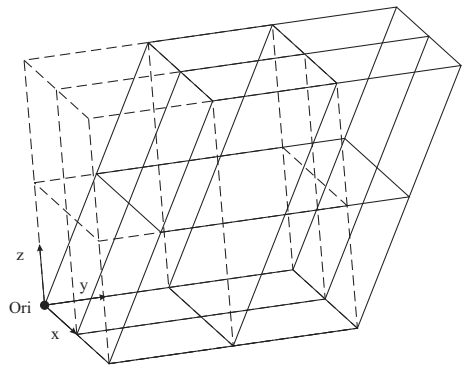


FIG. *6.5. Comparaison entre les résultats en petite et en grande déformation pour l'essai de traction*

Cisaillement simple Les données du calcul sont définies par la figure 6.6, et les résultats sur la figure 6.7. On observe que les niveau de contrainte obtenus en petite déformation et en grande déformation sont très différents quand la déformation dépasse 8%.



Agrégat :
- *8 élément C3D20*
- *81 nœuds*
- *243 Dof*

- *Paramètres matériau du tableau 6.1*

Condition du chargement :
- *Ori U1 0. ; U2 0. ; U3 0.*

Temps	*Plan (z=0)* *U2*	*Plan (z=1)* *U2*	*Plan (z=1)* *U3*
0.	*0.*	*0.*	*0.*
400.	*0.*	*0.5*	*0.*

Temps	*Plan (x=0)* *U1*	*Plan (x=1)* *U1*	*Plan (z=0)* *U3*
0.	*0.*	*0.*	*0.*
400.	*0.*	*0.*	*0.*

Orientation cristalline			
X1	*1.*	*0.*	*0.*
X3	*0.*	*0.*	*1.*

FIG. *6.6. Etats initial et déformé*

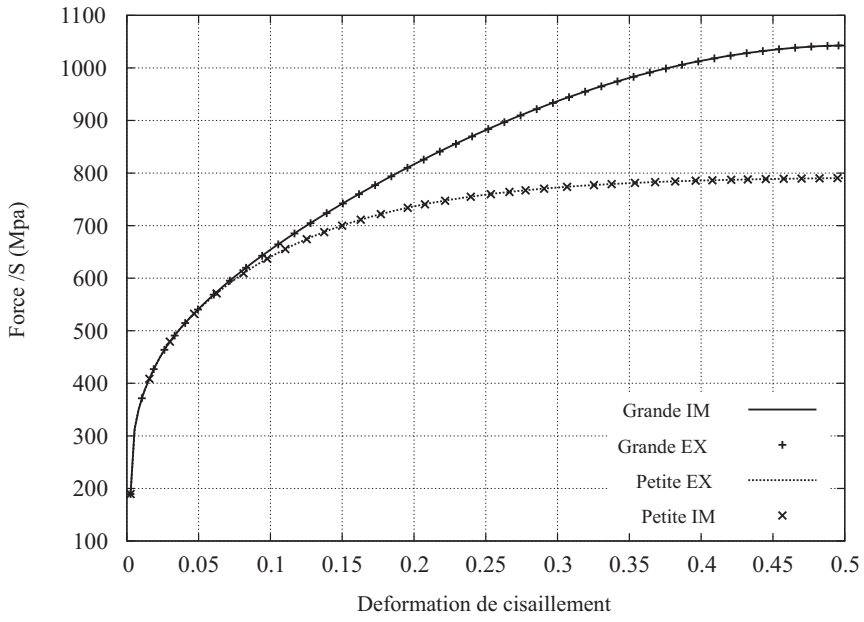


FIG. *6.7. Comparaison entre les résultats en petite et en grande déformation pour l'essai de cisaillement*

6.4 Conclusion

Nous avons maintenant à notre disposition quatre modèles de comportement dans ZéBuLoN :

Cadre d'implémentation	Algorithme d'intégration
Petite déformation	Explicite
Petite déformation	Implicite
Grande déformation	Explicite
Grande déformation	Implicite

Dans la suite, on se placera de façon systématique dans le cadre des grandes déformations, en utilisant le plus souvent l'intégration explicite.

Chapitre 7

Implémentation dans ZéBuLoN du modèle de Tabourot

Nous avons également implémenté dans ZéBuLoN le modèle de Tabourot, qui est voisin du modèle du chapitre précédent. Il y a également quatre versions pour cet modèle, deux dans le cadre des petites déformations et deux dans le cadre des grandes déformations. Afin de ne pas alourdir l'exposé, on se contente de spécifier les lois de comportement du modèle.

7.1 Description du modèle

Ce modèle est destiné à la description de la plasticité monocristalline des matériaux CFC.

7.1.1 Loi d'écoulement

La cission résolue τ^s, qui engendre la vitesse de glissement $\dot{\gamma}^s$ s'écrit :

$$\dot{\gamma}^s = \dot{\gamma}_0 \left(\frac{\tau^s}{\tau^s_\mu} \right)^{\frac{1}{m}} \tag{7.1}$$

où m est l'exposant de sensibilité à la vitesse, et $\dot{\gamma}_0$ la vitesse glissement de référence.

7.1.2 Cission interne

La contrainte de cission interne sur le système s dépend directement des densités de dislocations sur chaque système :

$$\tau^s_\mu = \alpha \mu b \sqrt{\sum_{u=1}^{N} d^{us} \rho^u} \tag{7.2}$$

où :

- α est un paramètre adimensionnel plus petit que 1 ;
- d^{us} caractérise l'effet des dislocations du système u sur celles du système s ;
- μ est le module de cisaillement ;
- b est la valeur du vecteur de Burgers.

7.1.3 Loi d'évolution de densités de dislocation

Cette loi est générée par Tabourot à partir de la relation proposée par Mecking et Estrin[H.Mecking, 1987]. Elle résulte de deux contributions, la vitesse d'accumulation et la vitesse d'annihilation des densités de dislocations.

$$\dot{\rho}^s = \frac{1}{b}\left(\frac{\sqrt{\sum a^{us}\rho^u}}{K} - 2y_c\rho^s\right)\dot{\gamma}^s \tag{7.3}$$

où K est un paramètre matériau. La terme a^{us} décrit l'effet des dislocations de la forêt sur le libre parcours moyen des dislocations. L'annihilation est contrôlée par la distance moyenne y_c. Deux dislocations s'annulent lorsqu'elles se croisent à une distance inférieure à y_c.

7.2 Test sur un point de Gauss

Les données des modèles figurent dans le tableau 7.1, et les conditions limites dans le tableau 7.3.

$E(MPa)$	ν	$\dot{\gamma}_0$	m	α	$\mu(MPa)$	K	ycs	r_i
110000	0.3	$1.e-10$	0.07	0.3	42000	38	3.36	$2.56e-6$
		$h0$	$h1$	$h2$	$h3$	$h4$	$h5$	
		0.2	0.2	0.3	0.3	0.4	0.4	

TAB. *7.1. Paramètres utilisés pour le test du modèle de Tabourot*

X1	1.	0.	0.
X3	0.	0.	1.

TAB. *7.2. Orientation cristalline*

Temps (s)	σ_{11} (MPa)	σ_{22} (MPa)	eto_{33}	σ_{12} (MPa)	σ_{23} (MPa)	σ_{31} (MPa)
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
400.0	0.0	0.0	0.2	0.0	0.0	0.0

TAB. *7.3. Conditions de chargement*

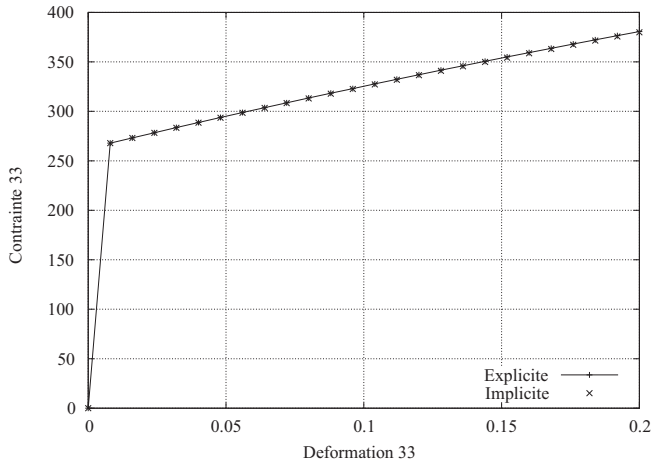


FIG. 7.1. *Courbe contrainte–déformation obtenues avec le modèle de Tabourot*

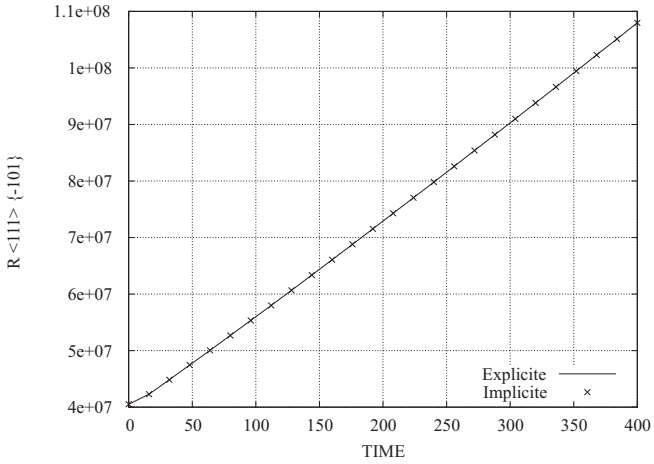


FIG. 7.2. *Densité de dislocations sur le système* $< 111 > \{-101\}$ *obtenues avec le modèle de Tabourot*

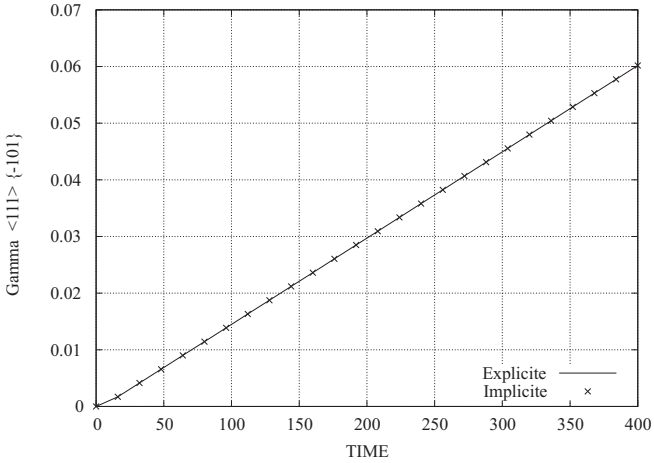
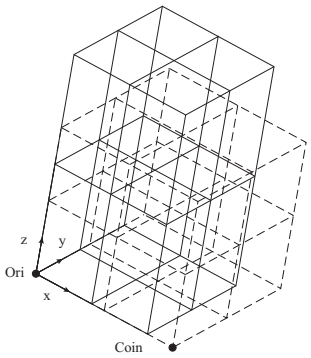


FIG. 7.3. *Glissement cumulé sur système* $< 111 > \{-101\}$ *obtenues avec le modèle de Tabourot*

7.3 Test avec un agrégat simple

On effectue des tests de traction simple et cisaillement simple sur un petit maillage comportant 8 éléments de type C3D20 (243 nœuds).

Traction simple. Les conditions du calcul sont reportées sur la figure 7.4, et les résultats en figure 7.5.



Agrégat :
- *8 élément C3D20*
- *81 nœuds*
- *243 Dof*
- *Paramètres matériau du tableau 6.1*

Conditions du chargement :
- *Ori U1 0. ; U2 0. ; U3 0.*
- *Coin U2 0. ; U3 0.*

Temps	*U3 du Plan (z=0)*	*U3 du Plan (z=1)*
0.	*0.*	*0.*
400.	*0.*	*0.5*

Orientation cristalline			
X1	*1.*	*0.*	*0.*
X3	*0.*	*0.*	*1.*

FIG. *7.4. Etats initial et déformé*

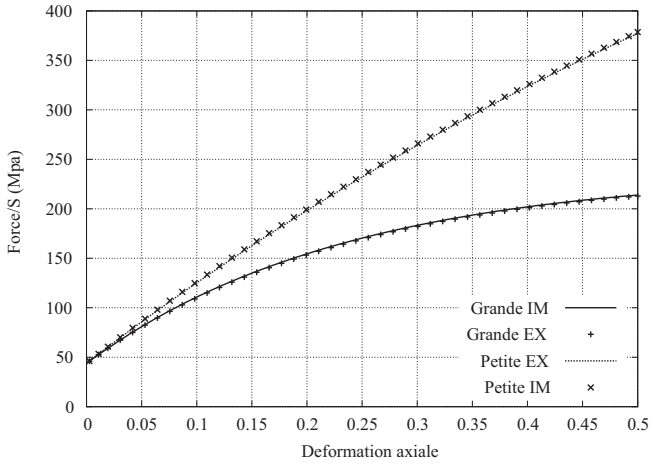
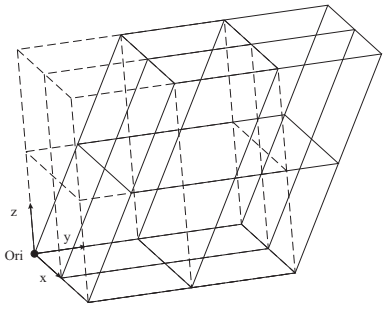


FIG. *7.5. Courbes contrainte–déplacement obtenues avec le modèle de Tabourot*

Cisaillement simple. Les conditions du calcul sont reportées sur la figure 7.6, et les résultats en figure 7.7.



Conditions du chargement :

Temps	*Plan (z=0)*	*Plan (z=1)*	*Plan (z=1)*
	U2	*U2*	*U3*
0.	*0.*	*0.*	*0.*
400.	*0.*	*0.5*	*0.*

Temps	*Plan (x=0)*	*Plan (x=1)*	*Plan (z=0)*
	U1	*U1*	*U3*
0.	*0.*	*0.*	*0.*
400.	*0.*	*0.*	*0.*

Orientation cristalline			
X1	*1.*	*0.*	*0.*
X3	*0.*	*0.*	*1.*

FIG. *7.6. Etats initial et déformé*

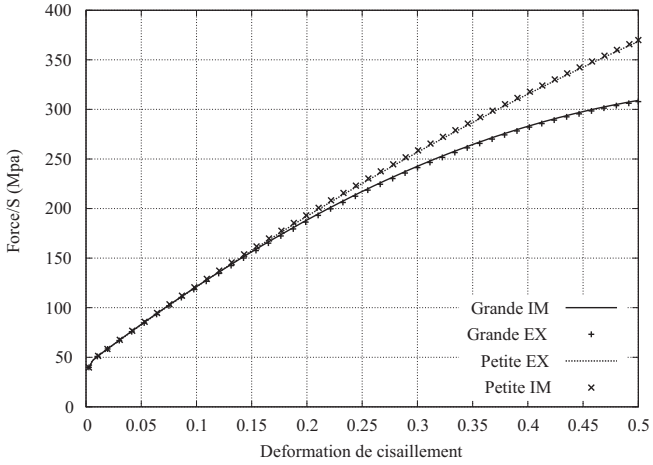


FIG. *7.7. Courbe contrainte-déplacement en cisaillement obtenues avec le modèle de Tabourot*

Chapitre 8

Introduction de l'effet d'irradiation

8.1 Introduction

Au niveau microscopique, l'irradiation crée des défauts dans l'acier de cuve : cavités, boucles de dislocation, précipité riche en cuivre. Elle favorise la précipitation, la ségrégation aux joints des grains, la ségrégation des phosphores...

Ces phénomènes microscopiques font que l'irradiation change presque tous les aspects du comportement mécanique au niveau macroscopique : augmentation de la limite d'élasticité, de la contrainte maximale, de la température de transition fragile–ductile, de la dureté, diminution du palier d'énergie ductile, etc...

Dans le cadre de ce travail, nous nous intéressons au changement du comportement ductile–fragile. Il importe donc, comme nous l'avons vu dans le chapitre 4, de bien prendre en compte les effets de l'irradiation sur le comportement pour obtenir des champs de contraintes et déformations réalistes. Partant de l'analyse de la bibliographie présentée au chapitre 4, nous déterminons les paramètres du modèle qui doivent rester indépendants de l'état d'irradiation. Nous effectuons ensuite une étude de la sensibilité du modèle aux paramètres en nous basant sur les effets de l'irradiation sur les courbes contrainte–déformation axiales. Ceci nous mène à mettre en œuvre le processus d'identification des paramètres effectué au chapitre 9.

8.2 Effet l'irradiation sur la courbe contrainte–déformation

Pour décrire les courbes contrainte–déformation de l'acier ferritique dans les états irradiés et non irradiés, il y a trois facteurs principaux : la forme de la courbe, la sensibilité à la vitesse de sollicitation, la sensibilité à la température. Pour étudier les modifications de la courbe contrainte–déformation sous l'effet d'irradiation, on va étudier les changements des trois facteurs.

Forme de la courbe. D'après les données expérimentales sur l'effet de l'irradiation (figure 8.1), la courbe macroscopique contrainte–déformation a tendance à se déplacer vers le haut. La limite d'élasticité et la contrainte maximale augmentent.

Sensibilité à la température. L'augmentation de la limite d'élasticité est une fonction de la température, mais l'influence de la température est faible. On retient l'expression suivante :

$$\boldsymbol{\sigma}_Y(\Phi, T) = \boldsymbol{\sigma}_Y(\Phi = 0, T) + \Delta\boldsymbol{\sigma}_Y(\Phi, T = 300K) \times g(T) \tag{8.1}$$

où ([Tanguy et al., 2005b]) :

$$g(T) = 1 + 0,83\exp(-2,81\frac{T}{T_0}) - 0,616\exp(-3\frac{T}{T_0}) \tag{8.2}$$

et : $g(-196°\mathrm{C})$=1,111 ; $g(-150°\mathrm{C})$=1,07 ; $g(-50°\mathrm{C})$=1,031.

Sensibilité à la vitesse de sollicitation. Il n'y a pas pour le moment de données mécaniques disponibles concernant la sensibilité à l'irradiation de la contrainte visqueuse.

Des simulations en dynamique des dislocations [Bacon and Osetsky, 2004], [Bacon and Osetsky, 2005], [Bacon and Osetsky, 2007] ont montré que la contrainte critique qui intervient dans la définition de la viscosité du matériau ne dépend pas de la vitesse de sollicitation quand $\dot{\gamma} < \dot{10}^7 \mathrm{s}^{-1}$ (Fig. 8.2). Dans notre cas, cette condition est automatiquement satisfaite :

$$\mid \dot{\gamma}^s \mid = \dot{\gamma}_0 exp\left[-\frac{\Delta G(\tau_{eff})}{k_b T}\right] = \dot{\gamma}_0 exp\left[-\frac{\Delta G_0}{k_b T}\left(1 - \left(\frac{\tau_{eff}}{\tau_R}\right)^p\right)^q\right] \leq \dot{\gamma}_0 = 10^6 s^{-1} \tag{8.3}$$

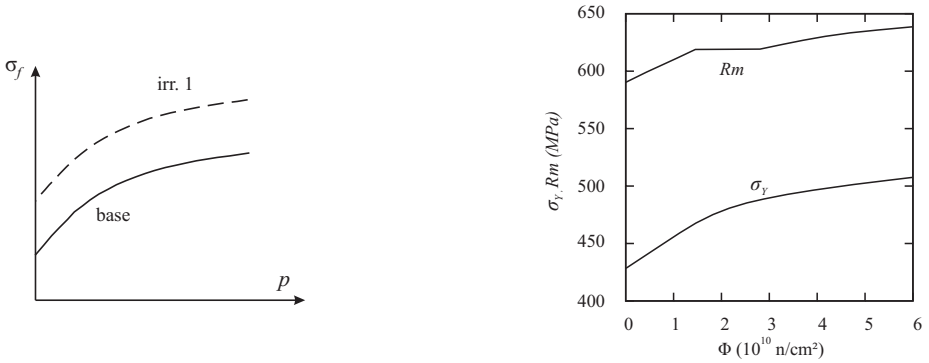


FIG. *8.1. Influence de l'irradiation sur la courbe contrainte–déformation [Tanguy et al., 2005b]*

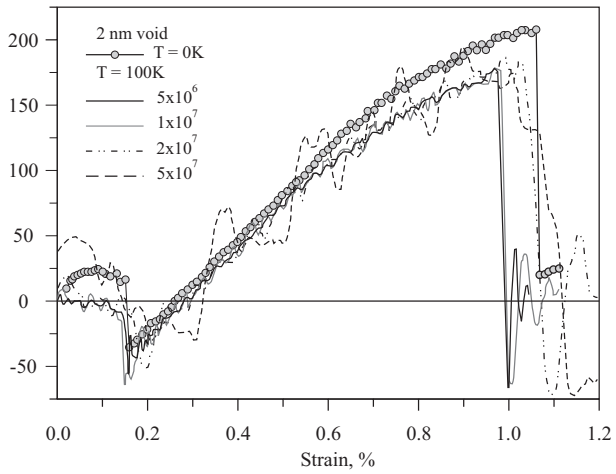


FIG. *8.2. Contrainte critique et vitesse de déformation*

8.3 Rappel des équations du modèle

Avant de manipuler le modèle, nous rappelons ici les équations déjà présentées en section 3.4 de la Partie I et la signification physique des paramètres.

Loi d'écoulement (éq. 3.44) est définie par :

$$\dot{\gamma}^s = \dot{\gamma}_0 exp\left[-\frac{\Delta G(\tau_{eff})}{k_b T}\right] sign(\tau_s) = \dot{\gamma}_0 exp\left[-\frac{\Delta G_0}{k_b T}\left(1-\left(\frac{\tau_{eff}}{\tau_R}\right)^p\right)^q\right] signe(\tau_s) \tag{8.4}$$

La règle d'écrouissage (éq. 3.48 et éq. 3.46) s'exprime comme :

$$\tau_{int} = \frac{(\alpha\mu b)^2\rho}{\tau^s - \tau_0} \tag{8.5}$$

$$\tau^s_{eff} = \tau^s - \tau_0 - \tau^s_{int} = \tau^s - \tau_0 - \frac{(\alpha\mu b)^2\rho}{\tau^s - \tau_0} \tag{8.6}$$

La loi d'évolution de densités de dislocation (éq. 3.51) s'écrit :

$$\dot{\rho}^s = \frac{\mid \dot{\gamma}^s \mid}{b}\left(\frac{1}{D_{grain}} + \frac{\sqrt{\sum_{s\neq u}\rho^u}}{K(T)} - g_c(T)\rho^s\right) \tag{8.7}$$

avec :

- ΔG : énergie d'activation du double décrochement ;
- k_B : constante de Boltzmann ;
- T : température absolue ;
- τ_{eff} : cission effective appliquée directement sur les dislocations ;
- τ_R : cission résolue pour déplacer la ligne de dislocation à température 0 K ;
- p, q : deux paramètres pour décrire l'allure de l'énergie d'activation ;
- $\dot{\gamma}_0$: vitesse de glissement en régime athermique ;
- τ_{int} : contribution de la forêt des dislocations pour empêcher le mouvement des dislocations ;
- τ_0 : contribution des carbures, des autres précipités et des joints des grains pour empêcher le mouvement des dislocations ;
- τ_s : cission résolue dans le plan du système de glissement ;
- ρ_s : densité de dislocations du système de glissement s ;
- a_{us} : coefficient caractérisant l'influence entre le système de glissement s et le système de glissement u ;
- μ : module de cisaillement ;
- b : vecteur de Burgers ;
- $\sqrt{\sum_{s\neq u}\rho^u}$: distance moyenne entre les dislocations perçant le plan du système s ;
- D_{grain} : taille moyenne de grain, dans la loi d'évolution des dislocations ($\frac{1}{D_{grain}}$ existe si le parcours libre moyen des dislocations est inférieur à la taille de grain) ;
- $K(T)$: coefficient caractérisant l'efficacité à retenir les dislocations ;
- $g_c(T)$: coefficient caractérisant l'efficacité de l'annihilation des dislocations dans un même système.

8.4 Analyse théorique

A partir des lois du modèle, on peut réexprimer chaque loi d'évolution.

• Loi d'écoulement :

$$\mid \dot{\gamma}^s \mid = \dot{\gamma}_0 exp\left[-\frac{\Delta G(\tau_{eff})}{k_b T}\right] = \dot{\gamma}_0 exp\left[-\frac{\Delta G_0}{k_b T}\left(1-\left(\frac{\tau_{eff}}{\tau_R}\right)^p\right)^q\right] \tag{8.8}$$

$$\Rightarrow \tau_{eff} = \quad \tau_R\left(1-\left(-\frac{k_B T}{\Delta G_0} ln\left(\frac{\mid \dot{\gamma}^s \mid}{\dot{\gamma}_0}\right)^{\frac{1}{q}}\right)\right)^{\frac{1}{p}} \tag{8.9}$$

$$\tau_{eff} = \quad f(T, \dot{\gamma}^s, \Delta G_0, \dot{\gamma}_0, \tau_R, p, q)$$

• Loi d'écrouissage :

$$\tau_{int} = \frac{(\alpha\mu b)^2 \rho}{\tau^s - \tau_0} \tag{8.10}$$

$$\tau^s = \tau_0 + \tau^s_{eff} + \tau^s_{int} \tag{8.11}$$

$$\Rightarrow \tau = \tau_0 + \frac{\tau_{eff}}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{\tau^2_{eff} + 4\left(\alpha\mu b\right)^2}\rho \tag{8.12}$$

• Loi d'évolution de densités de dislocations :

$$\dot{\rho}^s = \frac{\mid \dot{\gamma}^s \mid}{b}\left(\frac{1}{D_{grain}} + \frac{\sqrt{\sum_{s\neq u}\rho^u}}{K(T)} - g_c(T)\rho^s\right) \tag{8.13}$$

$$\Rightarrow \rho^s = f(\gamma^s, \rho^u, K, g) \tag{8.14}$$

On en déduit les règles phénoménologiques suivantes :

– le changement de T, $\dot{\gamma}^s$, ΔG_0, $\dot{\gamma}_0$, τ_R, p, q modifie τ_{eff}, donc change à la fois la limite d'élasticité et la forme de la courbe contrainte–déformation ;

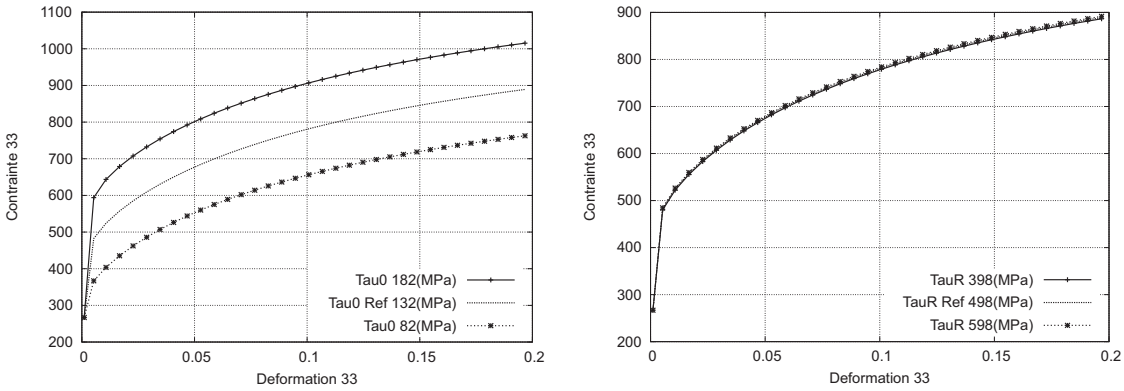
– le changement de K, g ne modifie que l'évolution de densité des dislocations, donc il ne change que la pente de la courbe contrainte–déformation ;

– le changement de τ_0 ne modifie que la limite d'élasticité, la forme de la courbe reste intacte.

8.5 Rôle de chaque paramètre sur la courbe contrainte–déformation

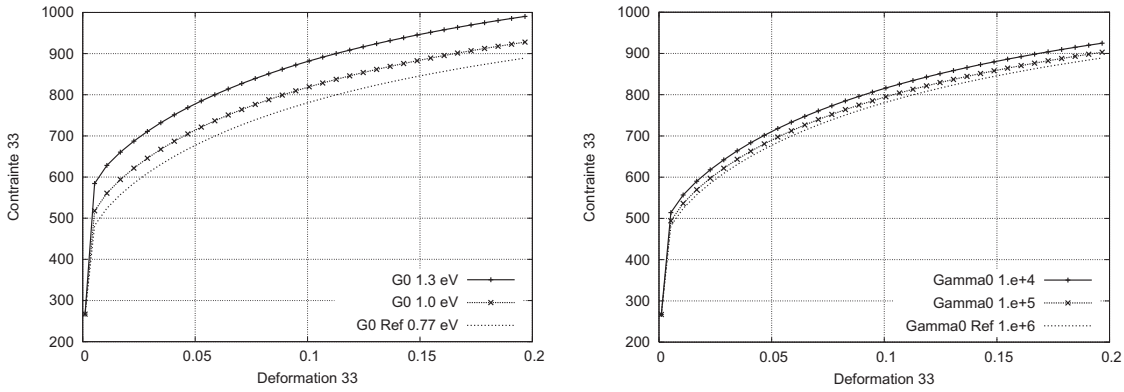
Pour savoir comment se comporte le modèle, on étudie de façon systématique l'influence de chaque paramètre sur la courbe contrainte–déformation. A chaque fois, on modifie un seul paramètre, les autres restent non modifiés. Tous les paramètres initiaux sont reportés dans le tableau 6.1. Le chargement imposé est une traction simple à déformation imposée jusqu'à 20% selon la composante ε_{33}, la vitesse de déformation étant $5 \times 10^{-4}\text{s}^{-1}$. Les simulations sont effectuées sur un point de Gauss comme les tests de la Section 6.3.1. L'influence de chaque paramètre pris individuellement peut être observées sur les figures 8.3, 8.4, 8.5 et 8.6 pour

une température donnée (25 $°C$). Les figures 8.7 et 8.8, quant à elles, illustrent les influences combinées de p et de la température, ainsi que de G_0 et le température, puis τ_0 et la température.



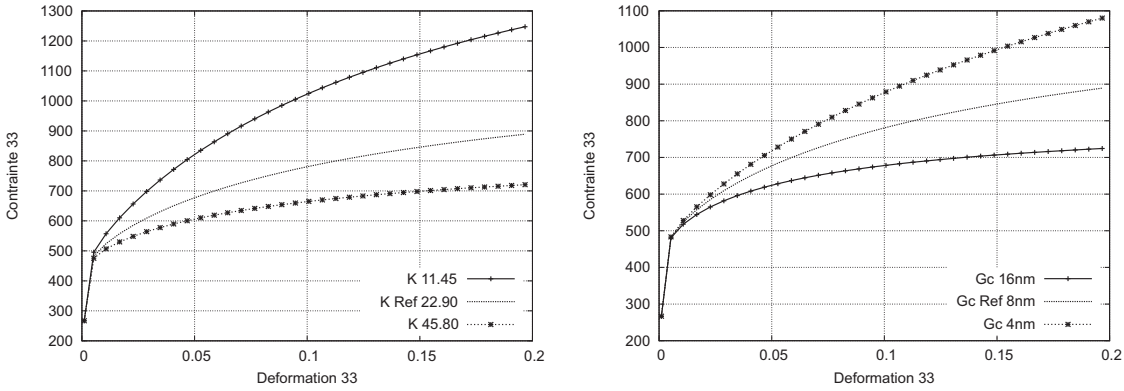
a)*Influence de* τ_0 b) *Influence de* τ_R

FIG. *8.3.* *τ_0 change la limite d'élasticité et ne change pas la forme de la courbe ; τ_R a une influence très faible sur la courbe, elle ne change pratiquement pas la limite d'élasticité ni la forme de la courbe*



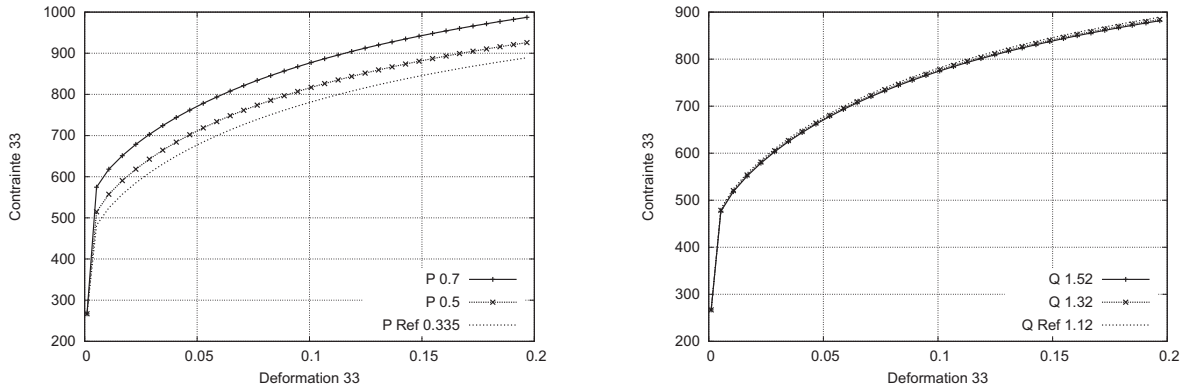
a) *Influence de* ΔG_0 b) *Influence de* $\dot{\gamma}_0$

FIG. *8.4.* *ΔG_0, $\dot{\gamma}_0$ changent la limite d'élasticité, mais pas la forme de la courbe.*



a) *Influence de* K b) *Influence* g_c

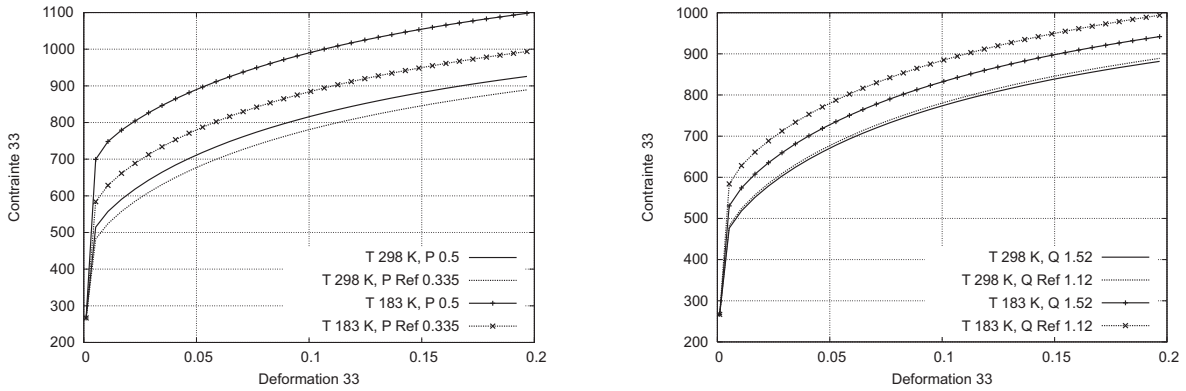
FIG. *8.5.* *K, g_c ne changent pas la limite d'élasticité, mais ils changent la forme de la courbe d'écrouissage. Plus K est petit, plus l'écrouissage est grand. Au contraire, plus g_c est petit plus l'écrouissage est grand*



a) *Influence de p* b) *Influence de q*

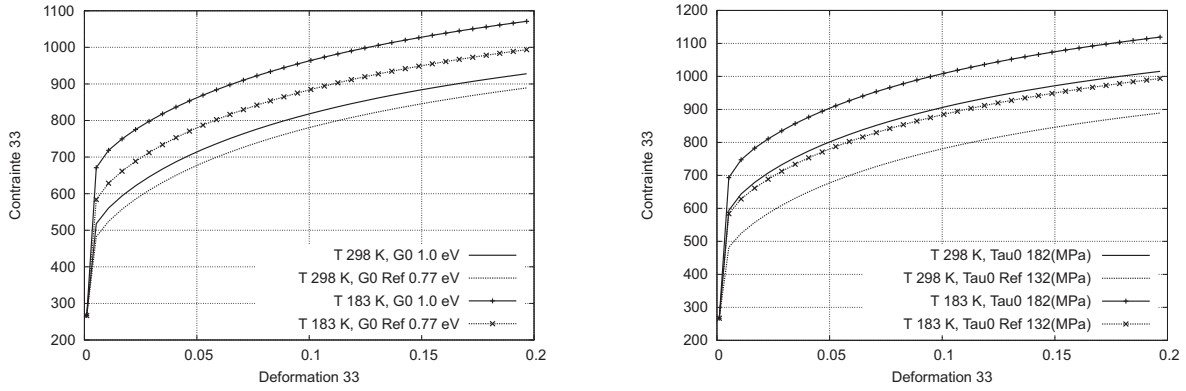
FIG. *8.6. p change légèrement la limite d'élasticité mais q ne change pas la courbe*

Pour reproduire l'effet de l'irradiation (déplacer vers le haut la courbe contrainte–déformation), on a donc la possibilité de changer un ou plusieurs paramètres (τ_0, ΔG, p ou q). De plus, comme l'effet de l'irradiation dépend de la température, on va tester l'influence de la température sur le changement des paramètres avant et après l'irradiation.



a) b)

FIG. *8.7. a) Influence combinée de p et de la température ; b) Influence combinée de q et de la température*



a) b)

FIG. *8.8. a) Influence combinée de G_0 et de la température ; b) Influence combinée de τ_0 et de la température*

On observe que l'influence de τ_0 sur la courbe contrainte–déformation ne dépend pas de la température, tandis que ΔG, p, q modifient faiblement la courbe contrainte–déformation à température ambiante (298 K). Donc, pour représenter correctement l'augmentation de la limite d'élasticité du matériau liée à l'irradiation, on doit combiner une variation de τ_0 avec un changement de ΔG, p, q.

8.6 Dépendance mutuelle entre les paramètres

D'après l'analyse effectuée dans la section précédente, on retient qu'il y a deux groupes de paramètres : ceux qui agissent sur la forme de la courbe contrainte–déformation (l'écrouissage) et ceux qui la translatent en affectant uniquement la limite d'élasticité. Il faut toutefois s'assurer que les effets observés restent similaires lorsqu'on fait varier simultanément plusieurs paramètres. Pour cette analyse de la dépendance mutuelle aux paramètres, on retient uniquement ceux qui affectent le plus les courbes contrainte–déformation présentées en section 8.5 : τ_0 comme paramètre influençant la limite d'élasticité ainsi que g_c, K comme paramètres influençant l'écrouissage.

8.6.1 Calcul d'erreur dans l'espace des paramètres

Pour mettre en œuvre l'analyse de la dépendance mutuelle aux paramètres, on effectue une comparaison systématique de la courbe simulée avec la courbe expérimentale prise en référence, pour une température donnée, en faisant varier les paramètres dans tout l'espace des paramètres choisis. La comparaison est faite au travers de la fonction d'erreur définie ci-après :

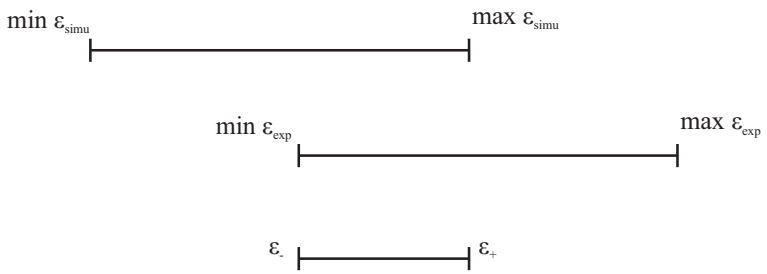


FIG. *8.9. Définitions de ε_-=max(min ε_{simu}, min ε_{exp}) et de ε_+=min(max ε_{simu}, max ε_{exp})*

$$Error \;=\; \frac{1}{2(\varepsilon_+ - \varepsilon_-)} \int_{\varepsilon_-}^{\varepsilon_+} \left(\sigma_{sim}(\varepsilon) - \sigma_{exp}(\varepsilon)\right)^2 d\varepsilon \tag{8.15}$$

où σ est la contrainte axiale et ε la déformation axiale.

8.6.2 Dépendance entre g_{cb} (g_c/b) et K

Les paramètres choisis pour l'étude sont reportés dans le tableau 8.1. Tous les paramètres sont fixés sauf g_{cb} et K. On définit les intervalles de variations des paramètres pour chaque température en fonction des ordres de grandeurs classiquement utilisés dans la littérature.

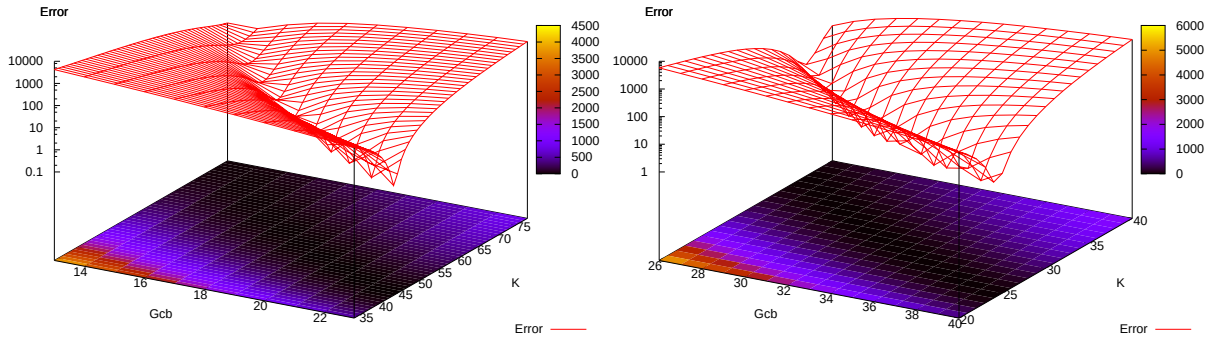
$C11$ (GPa)	$C12$ (GPa)	$C44$ (GPa)	$\dot{\gamma}_0$ (s^{-1})	τ_0 (MPa)	b (m)	a_{su}
$275,2$	$112,4$	$81,4$	10^6	$77,12$	$2,514 \times 10^{-10}$	$0,25$
K	r_i, i=1..24	d (m)	ΔG_0 (eV)	τ_R (MPa)	p	q
$22,9$	$2,633415 \times 10^{-7}$	$2,5 \times 10^{-6}$	$1,0$	498	$0,25$	$1,21$

TAB. *8.1. Paramètres utilisés pour étudier la dépendance entre les paramètres*

T	-120 °C	-90 °C
K	34–78	20–40
g_{cb}	13–28	26–40

TAB. *8.2. Domaine test pour la dépendance entre g_{cb} et K*

La valeur de la fonction erreur est présentée en figure 8.6.2.



Température -120 °C *Température -90 °C*

FIG. *8.10. Erreur entre la courbe simulation et la courbe expérimentale*

8.6.3 Dépendance entre g_{cb},K et τ_0

Sur la figure 8.6.2, on constate qu'il existe plusieurs solutions de couples (g_{cb}, K) qui satisfont à une erreur donnée et que ces solutions s'étendent sur un domaine convexe de l'espace des paramètres. Si l'on effectue la même analyse pour trois valeurs différentes de τ_0, on peut faire le même constat (Fig. 8.11). Cependant rien ne permet d'affirmer que les minima observés sont bien des minima globaux. Aussi nous effectuons en supplément une analyse dans l'espace complet des trois paramètres. La figure 8.12 fournit une visualisation de la valeur de l'erreur dans cet espace 3D et confirme que l'erreur minimale est obtenue dans un domaine étendu et convexe de l'espace des pamamètres g_{cb}, K et τ_0. Ceci indique que, contrairement à ce que l'on déduit de l'analyse de sensibilité des paramètres pris un à un, en section 8.5, la variation mutuelle de g_{cb}, K peut en plus d'influencer l'écrouissage, faire varier la valeur choisie pour la limite d'élasticité. Faire varier K et g_{cb} ne change rien la limite d'élasticité du matériau qui est toujours uniquement liée à τ_0 (si τ_0 ne varie pas la limite d'élasticité prévue par le modèle sera inchangée quelles

que soient les valeurs de K et g_{cb}). Par contre pour un choix de (K ; g_{cb}) correspond une valeur optimale de τ_0 et vice versa.

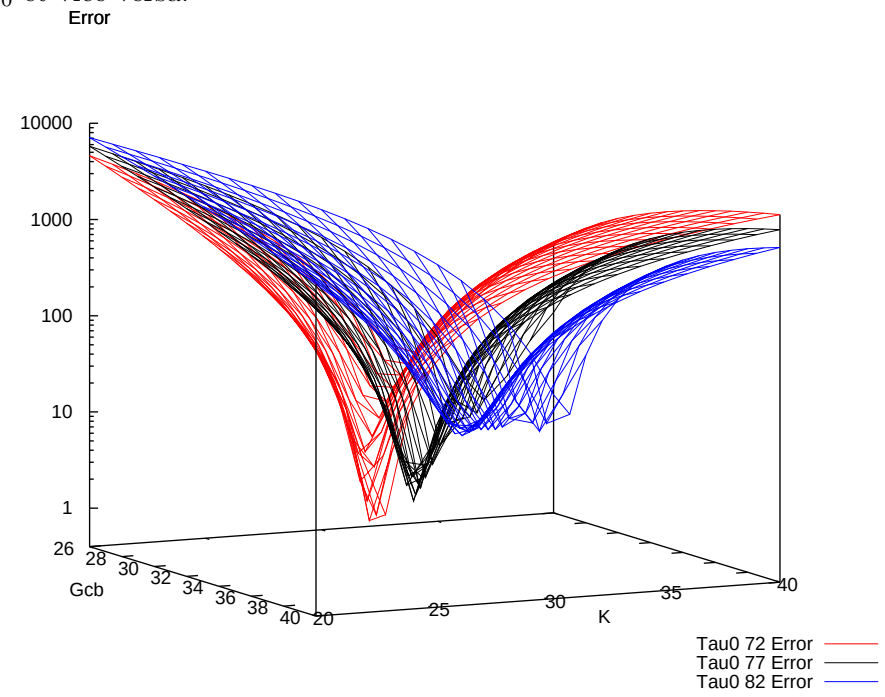
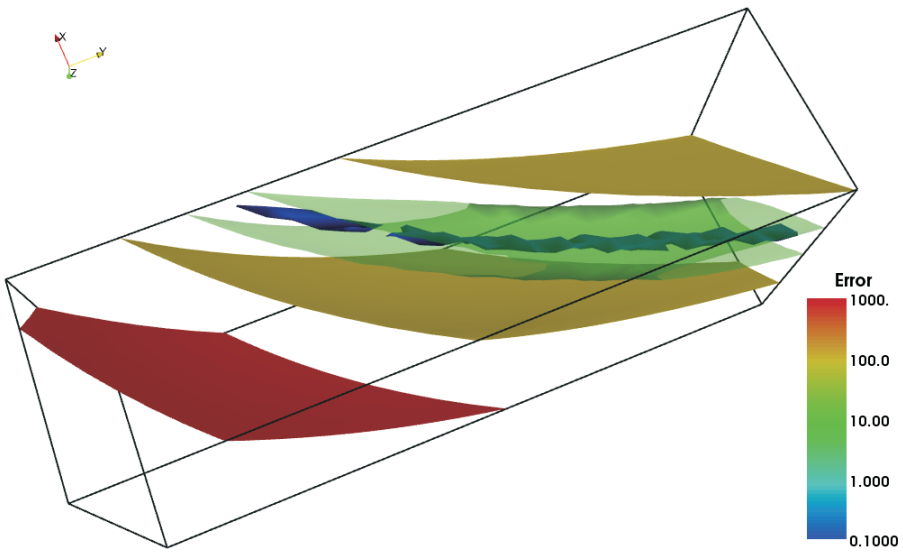


FIG. 8.11. *Erreur entre la courbe de simulation et la courbe expérimentale en fonction de g_{cb},K et τ_0 à une température de -90 °C*



X (Gcb)	*16.*	*26.*
Y (K)	*25.*	*60.*
Z (Tau0)	*71.*	*86.*

FIG. 8.12. *Erreur entre la courbe simulation et la courbe expérimentale en fonction de g_{cb},K et τ_0 à une température de -120 °C*

8.6.4 Conclusions

Dans les sections précédentes, on a constaté que :

- les paramètres g_{cb}, K ont une influence comparable sur le comportement du matériau. Ils ne sont pas indépendants ;
- on peut encore trouver des valeurs satisfaisantes de g_{cb}, K quand τ_0 change de façon importante. Ca veut dire que g_{cb},K ont non seulement une influence sur la forme de la courbe, mais encore sur sa hauteur.

Compte tenu des analyses précédentes et du fait qu'à l'origine g_{cb}, K sont deux paramètres qui sont introduits dans le groupe de paramètres qui ont un sens physique 8.3 on retient deux solutions pour prendre en compte l'effet de l'irradiation :

- modifier le paramètre τ_0 dans la loi d'écrouissage ;
- modifier les paramètres ΔG_0 et p, q.

Troisième partie

Application aux agrégats d'aciers ferritiques

Chapitre 9

Identification des paramètres

Les sensibilités aux paramètres du comportement en traction d'un monocristal ont été étudiées au chapitre 8. Ces paramètres sont maintenant identifiés pour le cas d'application de cette étude : l'acier 16MND5 dans sa phase bainitique polycristalline, à différentes températures et dans deux états : irradié et non-irradié.

9.1 Données expérimentales de référence

La base expérimentale de référence est constituée de courbes de traction simple jusqu'à 14% de déformation, présentées sur la figure 9.1, pour chaque température de l'étude. Les essais ont été effectués sur des éprouvettes 5 mm de diamètre et 30 mm de longueur dans la zone utile. La vitesse de déformation est de $0,5 \times 10^{-4}$ s-1. Les données de ces essais ont été sont fournies par le CEA [cea,].

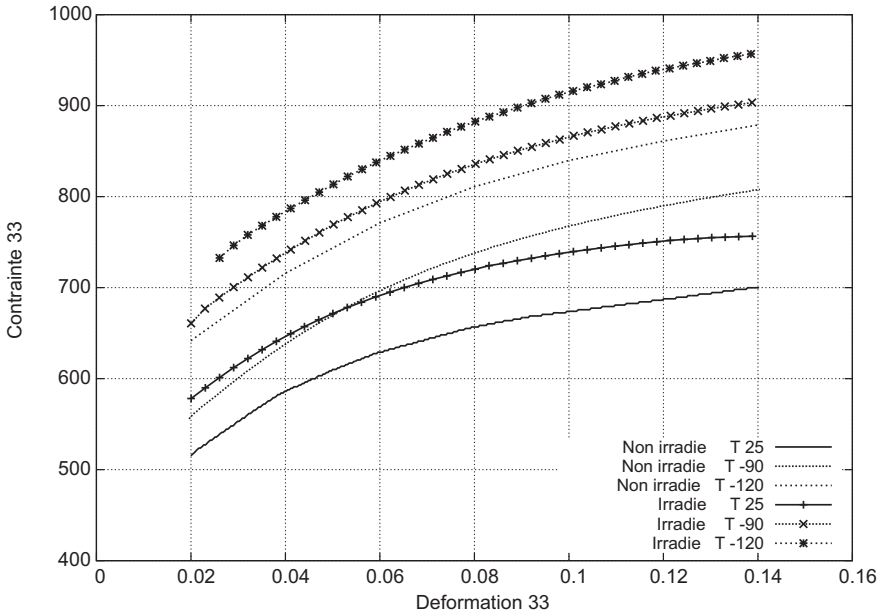


FIG. *9.1. Courbes de traction simple des matériaux non-irradiés et irradiés à différentes températures*

9.2 Valeurs des paramètres d'après Libert

Le tableau 9.1 reproduit les valeurs fournie par Libert [Libert, 2007b], qui sont utilisées comme point de départ de notre identification. Certains paramètres prennent des valeurs classiques pour un acier de structure CC, alors que d'autres proviennent d'observations directes (d, ρ).

$C11(GPa)$	$C12(GPa)$	$C44(GPa)$	$\dot{\gamma}_0(s^{-1})$	$d(\mu m)$	$b(m)$	a_{su}	$\rho(m^{-2})$
275.2	112.4	81.4	10^6	2.5	2.514×10^{-10}	0.25	10^{14}

τ_0 du systèmes de glissement	24
$\tau_0(110)$	τ_0
$\tau_0\,(112)$	τ_0 si $T > 206$
	$\tau_0 + 73.6 - 0.357T$ si $T \leqslant 206$

TAB. *9.1. Valeurs des paramètres de départ pour l'acier 16MND5, d'après [Libert, 2007b]*

9.3 Bornes pour les paramètres

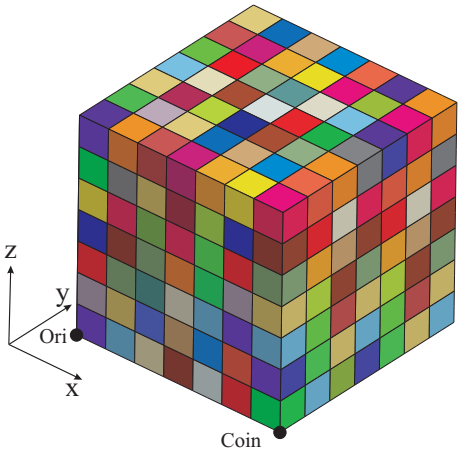
D'après les travaux présentés dans [Groh and Conte, 1971], les paramètres p, q, ΔG et τ_R doivent être définis dans les domaines suivants :

P	Q	ΔG (eV)	τ_R (MPa)
0,25	0.75	0,70	350
0,75	1.50	1,25	500

TAB. *9.2. Domaines recommandés pour les paramètres, d'après [Groh and Conte, 1971]*

9.4 Identification préliminaire sur un agrégat simplifié

La première étape d'identification est effectuée sur un agrégat polycristallin dont la microstructure est modélisée simplement : dans un maillage réglé constitué d'éléments hexaédriques identiques, chaque élément forme un grain du polycristal. Divers travaux [Barbe et al., 2001c, Barbe et al., 2001a, Diard et al., 2005b] ont montré que cette représentation fournissait une première estimation acceptable du comportement macroscopique d'un Volume Elémentaire Représentatif (VER), pourvu que le nombre de grains soit suffisant. L'agrégat choisi pour cette identification préliminaire contient $7 \times 7 \times 7$ grains / éléments. Il est décrit sur la figure 9.2, en même temps que les conditions de chargement correspondant aux essais expérimentaux pris en référence. Une simulation de traction s'effectue sur un processeur standard à 2 Go de mémoire vive en 1 à 2 heures.



Agrégat :
- *343 (7^3) élément C3D20*
- *1856 nœuds*
- *5568 degrés de liberté*
- *orientation cristalline aléatoire par élément*

Condition du chargement :
- *Ori U1 0. ; U2 0. ; U3 0.*
- *Coin U2 0. ; U3 0.*

Temps	*U3 du Plan (z=0)*	*U3 du Plan (z=1)*
0.	*0.*	*0.*
280.	*0.*	*0.14*

FIG. *9.2. Agrégat simplifié à 343 grains pour l'identification préliminaire et conditions du chargement imposées*

Suivant les préconisations rappelées au chapitre 8, seuls les paramètres ΔG et τ_0 varient entre l'état irradié et l'état non-irradié. Les paramètres variables en fonction de la température sont K et g_{cb}. De tous les jeux de paramètres permettant de reproduire correctement les courbes expérimentales, nous en avons retenu un à caractère médian, pour lequel chaque paramètre prend une valeur moyenne dans l'intervalle préalablement exploré pour chaque paramètre. Cette stratégie permet de s'assurer de la pertinence physique des paramètres choisis, et d'éviter les effets de bord lors des interpolations aux températures intermédiaires.

Les courbes résultant de ces identifications sont présentées en figures 9.3 et 9.4, pour l'état non irradié et irradié respectivement. Les paramètres correspondants sont reportés dans les tableaux 9.3 et 9.4. Les autres jeux de paramètres qui ont été identifiés figurent en annexe E.2.

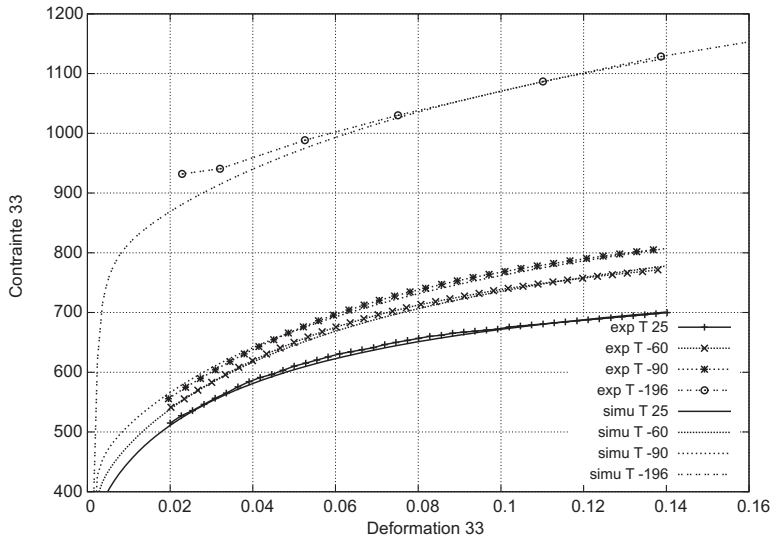


FIG. *9.3. Courbes de traction simple pour l'état non-irradié : expérience et simulation avec l'agrégat simplifié*

ΔG	0,749 eV	p	0,35		$-196°C$	$-90°C$	$-60°C$	$25°C$
τ_R	498 MPa	q	1,21	K	120	40	23	12
τ_0	40,82 MPa			g_{cb}	11,5	26,5	41	87

TAB. *9.3. Paramètres pour matériaux non-irradiés*

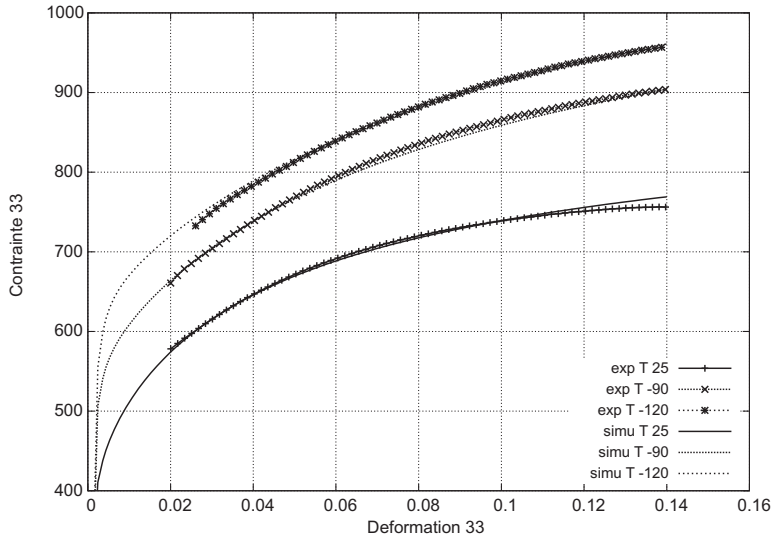


FIG. *9.4. Courbes de traction simple pour l'état irradié : expérience et simulation avec agrégat simplifié*

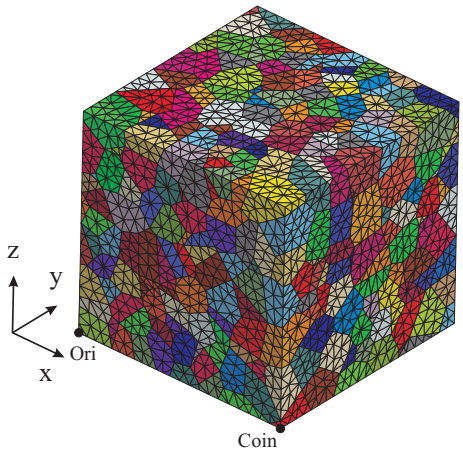
ΔG	0,955 eV	p	0,35		$-120°C$	$-90°C$	$25°C$
τ_R	498 MPa	q	1,21	K	105	40	12
τ_0	54,68 MPa			g_{cb}	14	26,5	87

TAB. *9.4. Paramètres pour matériaux irradiés*

9.5 Identification finale

Les paramètres identifiés avec l'agrégat simplifié sont ensuite testés dans le cas d'un agrégat à microstructure plus réaliste (Fig. 9.5) : il contient 1000 grains d'orientations aléatoires représentés par une mosaïque de Voronoï maillée avec des tétraèdres, de telle sorte que les éléments respectent les frontières de grains. ‘ La modélisation d'une morphologie microstructurale de polycristaux par des mosaïques de Voronoï est une solution couramment adoptée pour tenir compte du caractère aléatoire d'une morphologie. On la retrouve dans de nombreuses études de propriétés mécaniques de milieux cristallins [Barbe et al., 2001a, Nygards and Gudmundson, 2002, Zhao and Tryon, 2004, Diard et al., 2005b, Zeghadi et al., 2007, Osipov et al., 2008b, Lebensohn et al., 2009], [Musienko and Cailletaud, 2009]. Etant donné la complexité des contraintes géométriques à respecter pour générer le maillage, la solution de discrétisation la plus simple et la moins coûteuse en éléments finis consiste à utiliser un maillage régulier puis à définir les grains comme des ensembles d'éléments ou des ensembles de points d'intégration (éléments multiphases). Les frontières de

grains prennent alors l'allure d'escaliers, ce qui n'est pas acceptable si l'on s'intéresse aux champs locaux, en particulier au niveau des joints de grains. La génération d'un maillage libre qui respecte rigoureusement les frontières de grains peut poser deux problèmes : soit le nombre d'éléments nécessaires pour tenir cet engagement devient très grand car de nombreuses petites arêtes sont présentes au sein de la mosaïque ; soit le maillage doit faire appel à des éléments finis de mauvaise qualité (distordus, allongés,...) pour respecter les frontières sans être trop gourmand en éléments. Ces problèmes sont d'autant plus fâcheux pour la simulation EF que le nombre de grains est important. C'est pourquoi nous avons adopté la méthodologie offerte par le logiciel de génération de microstructure Neper [Neper, 2009]. Elle consiste à mailler des mosaïques de Voronoï en les modifiant légèrement afin de faciliter la génération d'un maillage de bonne qualité avec un nombre réduit d'éléments [Quey and Barbe, 2007]. Ces modifications portent essentiellement sur l'élimination des petites arêtes de polyèdres, si bien que les caractères principales d'une mosaïque de Voronoï sont préservées. Des polycristaux contenant de l'ordre de 10000 grains peuvent être générés avec cette approche.



Agrégat :
- *74 442 élément C3D10*
- *104 092 nœuds*
- *312 276 degrés de liberté*
- *Paramètres matériau du Tableau 9.4*

Condition du chargement :
- *Ori U1 0. ; U2 0. ; U3 0.*
- *Coin U2 0. ; U3 0.*

Temps	*U3 du Plan (z=0)*	*U3 du Plan (z=1)*
0.	*0.*	*0.*
280.	*0.*	*0.14*

FIG. *9.5. Agrégat utilisé pour l'identification finale*

Les travaux précédant cette étude [Osipov, 2007, Osipov et al., 2008b] ont permis d'établir les caractères principaux d'une microstructure d'acier bainitique à préserver dans une modélisation micromécanique visant à déterminer une probabilité de rupture par clivage. Il faut en particulier tenir compte d'une désorientation cristallographique entre paquets bainitiques basée sur la physique. Deux solutions de relations d'orientations s'offrent alors pour définir les orientations des paquets en fonction des orientations des grains austénitiques dont ils sont issus : Kurdjumov-Sachs (KS) et Nishiyama-Wassermann (NW).

Le choix d'un type de relation d'orientation, ou d'orientations aléatoires, ne doit cependant pas affecter les propriétés apparentes du polycristal sinon celui-ci n'est pas un VER. Différentes configurations ont donc été testées, préalablement à l'identification, pour s'assurer de la représentativité d'un agrégat à 1000 paquets bainitiques. Pour chaque configuration testée comme pour toute la suite de cette étude, un paquet bainitique est représenté par une cellule de Voronï. C'est une solution alternative à celle proposée dans les travaux d'Osipov, qui permet de respecter plusieurs caractères fondamentaux de la morphologie modélisée : *(i)* les frontières entre paquets doivent respecter les frontières d'éléments afin de ne pas introduire de perturbations liées à la discrétisation au voisinage des frontières ; *(ii)* le nombre de paquets par grain primaire

doit être de l'ordre de 50 ; *(iii)* le nombre de grains primaires doit être suffisamment grand pour que le polycristal soit un VER.

Dans la première configuration, les cellules de Voronoï constituent chacune un paquet bainitique d'orientation aléatoire. Dans les quatre suivantes, les orientations de paquets sont déduites par KS ou NW et on considère 20 grains primaires découpés en 50 paquets ou 50 grains primaires découpés en 20 paquets chacun. Pour chaque configuration, un paquet est donc constitué d'une cellule de Voronï. Chaque configuration est résumée dans le tableau 9.5. Les courbes de traction obtenues pour chaque configuration (figure 9.6) montrent que le polycristal utilisé pour l'identification est bien représentatif.

No.1	1000 paquets d'orientations aléatoires
No.2	20 grains primaires, 50 paquets, KS
No.3	20 grains primaires, 50 paquets, NW
No.4	50 grains primaires, 20 paquets, KS
No.5	50 grains primaires, 20 paquets, NW

TAB. *9.5. Les configurations d'agrégats pour l'identification finale*

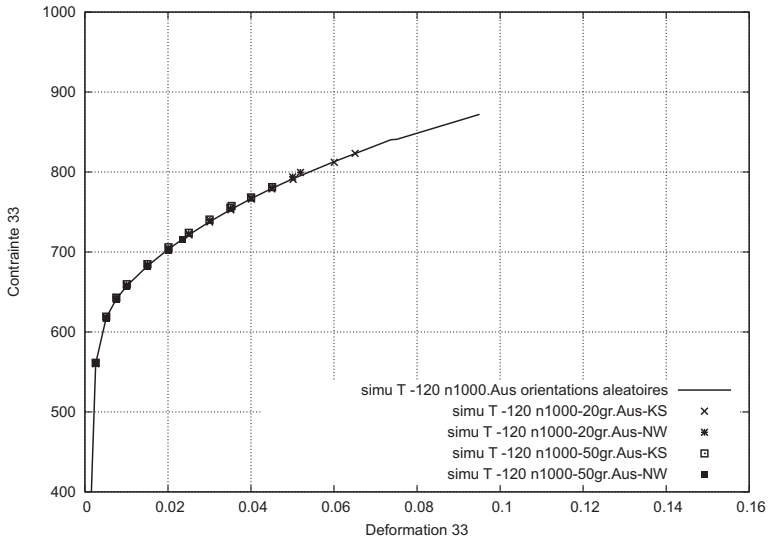


FIG. *9.6. Les courbes de traction simple simulée pour chaque configuration d'agrégat à 1000 cellules de Voronoï*

La configuration N^o.1 a donc été retenue pour affiner l'identification préliminaire. Les courbes de traction des figures 9.7 et 9.8, et les paramètres des tableaux 9.6 et 9.7 ont ainsi été obtenus, pour le matériau non-irradié et irradié respectivement.

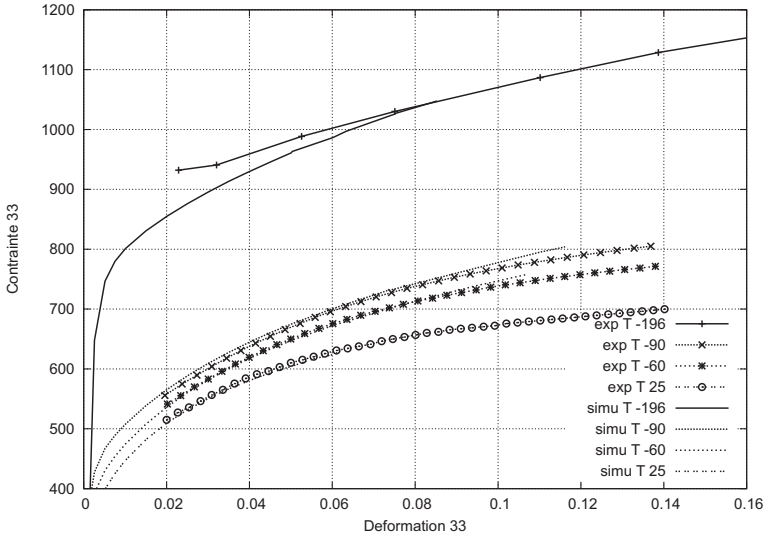


FIG. *9.7. Courbes de traction simple issues de l'identification finale pour l'état non-irradié*

ΔG	0,749 eV	p	0,35		$-196°C$	$-90°C$	$-60°C$	$25°C$
τ_R	498 MPa	q	1,21	K	75	30	20	11
τ_0	40,82 MPa			g_{cb}	10	25	36,5	77

TAB. *9.6. Paramètres issus de l'identification finale pour l'état non-irradié*

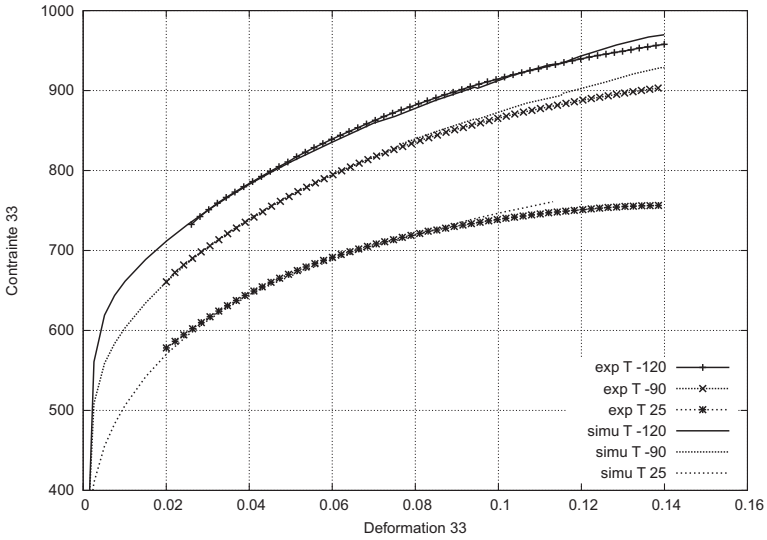


FIG. *9.8. Courbes de traction simple issues de l'identification finale pour l'état irradié*

ΔG	0,955 eV	p	0,35		$-120°C$	$-90°C$	$25°C$
τ_R	498 MPa	q	1,21	K	65	30	11
τ_0	54,68 MPa			g_{cb}	14	25	77

TAB. *9.7. Paramètres issus de l'identification finale pour l'état irradié*

Au-delà de l'objectif d'identifier les paramètres pour cette étude de l'acier 16MND5, on remarque qu'entre l'identification préliminaire et l'identification finale seuls les paramẽtres K et g_{cb} ont été modifiés (voir les tableaux 9.8 et 9.9). La démarche d'identification des paramètres des lois de comportement de cette étude peut donc être résumée de la façon suivante :

1. pré-identification de tous les paramètres sur agrégat à microstructure simplifié et à orientations aléatoires ;
2. affinage de l'identification de K et g_{cb} sur agrégat à haute résolution de microstructure et orientations aléatoires.

Paramètres communs		Paramètres différents					
ΔG	0,749 eV		$-196°C$	$-90°C$	$-60°C$	$25°C$	
τ_R	498 MPa	K	120	40	23	12	Identifié sur
τ_0	40,82 MPa	g_{cb}	11,5	26,5	41	87	343 cubes
p	0,35						
q	1,21	K	75	30	20	11	Identifié sur
		g_{cb}	10	25	36,5	77	1000 Voronoï

TAB. *9.8. Bilan des identifications pour matériau non-irradié*

Paramètres communs		Paramètres différents				
ΔG	0,955 eV		$-120°C$	$-90°C$	$25°C$	
τ_R	498 MPa	K	105	40	12	Identifié sur
τ_0	54,68 MPa	g_{cb}	14	26,5	87	343 cubes
p	0,35					
q	1,21	K	65	30	11	Identifié sur
		g_{cb}	14	25	77	1000 Voronoï

TAB. *9.9. Bilan des identifications pour matériau irradié*

Chapitre 10

Calculs et Résultats

Ce chapitre est consacré à la description des calculs sur lesquels est basée l'analyse de probabilité de rupture. On présente ici l'agrégat considéré, les conditions limites et quelques résultats de dépouillement pour chaque température et chaque état d'irradiation. Les lois de comportement ont été présentées au chapitre 3 et les paramètres sont issus des identifications du chapitre 9.

10.1 Agrégat et Conditions limites

10.1.1 Choix d'un agrégat polycristallin

Le choix de l'agrégat va résulter d'un compromis entre deux critères : la notion de représentativité de l'agrégat vis-à-vis du comportement local d'une part, et la nécessité de limiter la taille et la durée des simulations numériques d'autre part.

D'après les analyses microstructurales sur cet acier fournies dans les travaux d'Osipov *et al* [Osipov, 2007, Osipov et al., 2008b], il faut tenir compte d'environ 50 paquets bainitiques par grain primaire. L'analyse de la rupture présentée au chapitre 5 considère les contraintes moyennées par paquets comme entité élémentaire. Il importe donc que ces contraintes ne dépendent pas de la discrétisation en éléments finis. Ceci implique en premier lieu d'utiliser une discrétisation fine à l'intérieur de chaque paquet. Ceci exclut par ailleurs l'utilisation d'un maillage régulier dans lequel les paquets seraient décrits par des ensembles d'éléments ou des ensembles de points d'intégration : les frontières entre paquets ne correspondraient alors pas à des surfaces lisses.

On utilise donc des mosaïques de Voronoï discrétisées librement (les frontières de cellules de Voronoï sont alors confondues avec des frontières d'éléments). Chaque cellule est considérée comme un paquet bainitique et on regroupe les cellules par domaines représentant les grains primaires d'austénite. La mosaïque de Voronoï ainsi que la discrétisation libre en tétraèdres est obtenue avec le logiciel de génération de microstructure Neper [Neper, 2009, Quey and Barbe, 2007] associé au mailleur libre Gmsh [Gmsh 1.60, 2005]. Les caractéristiques de l'agrégat retenu et son image sont présentées dans le tableau 10.1 et en figure 10.1.

Les orientations cristallographiques des paquets ne doivent pas être choisies aléatoirement. Elles doivent respecter les relations d'orientation couramment observées dans les matériau ayant subi une transformation martensitique ou bainitique. Pour cette étude, nous avons choisi les relations d'orientations de Nishiyama et Wassermann (NW). Par contre, les orientations cristallographiques des grains primaires austénitiques sont définies aléatoirement, l'orientation d'un

paquet étant ensuite prise aléatoirement parmi les 12 variants possibles que fournit la relation NW.

4 096 (16^3)	cellules de Voronoï
323 960	éléments C3D10
Environ 161 ($5,5^3$)	éléments par grain
442 164	nœuds
80	Grains primaires
$\sim$ 50	paquets bainitiques par grain

TAB. *10.1. Descriptif de l'agrégat*

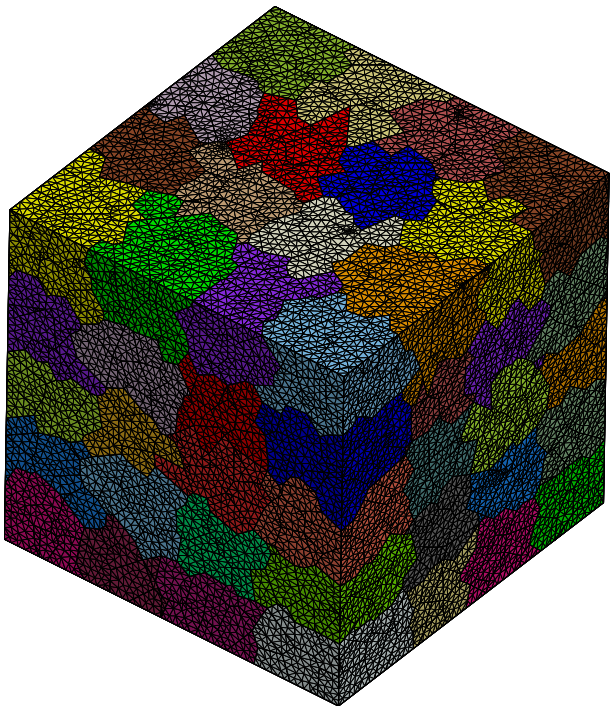


FIG. *10.1. Agrégat utilisé pour l'analyse de la rupture*

10.1.2 Détermination des conditions aux limites

L'approche micromécanique locale de la rupture doit être appliquée à un élément de volume localisé en fond de fissure d'une éprouvette CT. Nous avons donc choisi, comme sollicitations typiques d'un tel élément de volume, d'exercer une traction en déformation plane avec une triaxialité χ (voir équation 10.1) maintenue à 2 au cours du chargement dans le domaine plastique. On a :

$$< \chi >= \frac{< p >}{< \sigma_{mises} >} \tag{10.1}$$

Où : $< p >= \frac{1}{3}\sum_{k=1}^{3} < \sigma_{kk} >$

$$< \sigma_{mises} >= \sqrt{\frac{1}{2}[(< \sigma_I > - < \sigma_{II} >)^2 + (< \sigma_{II} > - < \sigma_{III} >)^2 + (< \sigma_{III} > - < \sigma_I >)^2]}$$

Ceci permet d'analyser l'évolution de la probabilité de rupture en fonction de la déformation et pour une même triaxialité. Un des objectifs de cette étude étant de mettre en évidence l'effet de grandes déformations, les calculs seront poursuivis jusqu'à atteindre une déformation axiale de l'ordre de 10%. Les conditions aux limites sont définies en termes de déplacements imposés sur les faces de l'agrégat (notées $(x = 0)$, $(x = 1)$, $(y = 0)$, $(y = 1)$, $(z = 0)$ et $(z = 1)$), ce qui donne une efficacité maximale au calcul parallèle. Alors que les faces de normale $\vec{y}$ restent dans leurs plans d'origine respectifs pour assurer une déformation plane, les faces de normale $\vec{z}$ permettent d'imposer les conditions de traction, et celles de normale $\vec{x}$ sont utilisées pour maintenir la triaxialité χ à 2 en imposant un déplacement U_x : $U_x(x = 0) = 0$ et $U_x(x = 1) = U^\chi(t)$.

Pour déterminer les valeurs de $U^\chi(t)$ à différents instants t_i du chargement, pour chaque température et état d'irradiation considéré, on fait appel à l'agrégat à 343 grains utilisé pour les identifications préliminaires (chapitre 9). Effectivement, cet agrégat associé à ses jeux de paramètres propres a les mêmes propriétés effectives que l'agrégat à 4096 grains. Il peut donc être exploité à moindre coût pour estimer $U^\chi(t)$ au travers de plusieurs tests de traction.

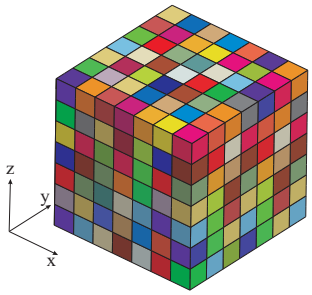
Le premier test, pris en référence, consiste à maintenir le volume constant au cours de la traction à déformation plane. Les conditions de déplacements imposés pour ce test sont présentées sur la figure 10.2 pour le matériau non-irradié à -90°C. Les déplacements normaux de chaque face étant définis, sauf le déplacement normal $U_x(x = 1, t) = U_x^{V=1}(t)$ imposé à la face $(x = 1)$, on déduit celui-ci de l'expression du volume V de l'agrégat :

$$V(t) \;=\; (1 + U_x(x = 1, t)) \times (1 + U_y(y = 1, t)) \times (1 + U_z(z = 1, t)) \;= 1. \tag{10.2}$$

où 1 est la longueur d'un côté de l'agrégat.

Ce test de référence conduit à une évolution de la triaxialité au cours du chargement tel que présenté sur la figure 10.3). Si on impose le déplacement $U_x(x = 1, t) \;=\; \eta U_x^{V\,constant}(t)$ où η prend des valeurs entre 0 et 1, d'autres courbes d'évolution de la triaxialité sont obtenues. Chacune de ces courbes passe, à un instant t_i (reporté sur la figure 10.3), par une valeur de triaxialité de 2. On en déduit alors un ensemble de valeurs de déplacement $U^\chi(t_i)$ correspondant aux valeurs de $U_x(x = 1, t_i)$ imposées pour chaque calcul. L'évolution de $U^\chi(t)$ par pas de temps de calcul est alors estimée par interpolation linéaire entre les différents valeurs de $U^\chi(t_i)$.

Cette même démarche est suivie pour chaque température et chaque état d'irradiation. Les tableaux décrivant les évolutions de $U_z(z = 1, t)$ et de $U_x(x = 1, t)$ par pas de temps sont fournis en annexe E.3.



Condition limite de base :

- $U_y(y = 0, t) \;=\; 0,\; U_y(y = 1, t) \;=\; 0$
- $U_z(z = 0, t) \;=\; 0,\; U_z(z = 1, t) \;=\; \dfrac{0,14}{280} t.$
- $U_x(x \;=\; 0, t) \;=\; 0,\; U_x(x \;=\; 1, t) \;=\; U_x^{V=1}(t) \;=\; \dfrac{1}{1 + U_z(z = 1, t)} - 1.$

FIG. *10.2. Agrégat simplifié et conditions limites du test de traction à déformation plane et volume constant*

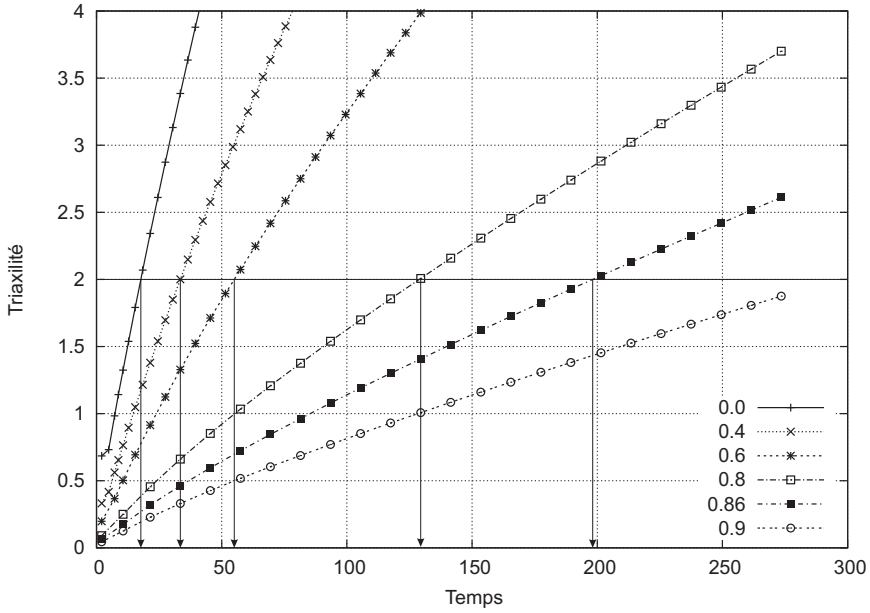


FIG. *10.3. Détermination de $U^{\chi}(t_i)$ à partir des tests pour différentes valeur de η*

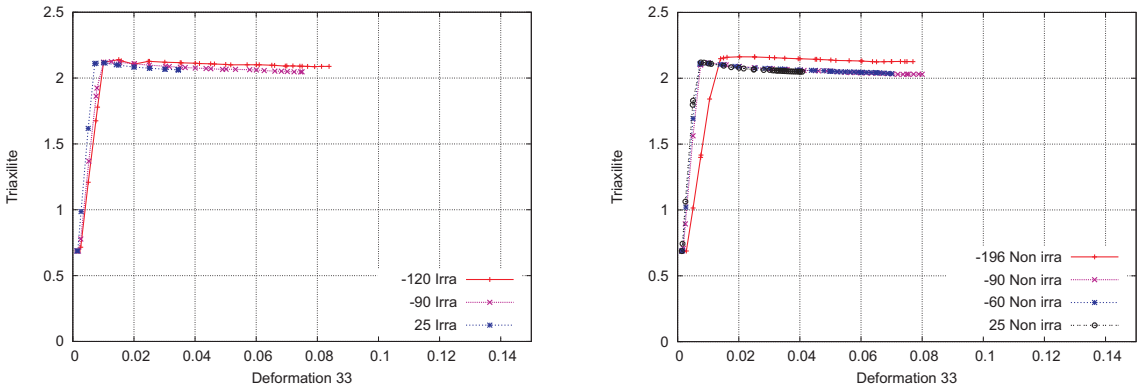
10.2 Analyse des résultats à l'échelle globale

Cette partie propose une analyse préliminaire des résultats de calculs pour les essais à triaxialité $\chi = 2$ aux différentes températures de l'étude. Elle est effectuée ici à l'échelle dite *globale* de l'agrégat, c'est-à-dire en prenant en compte le comportement de *tous* les points d'intégration de l'agrégat, concernant successivement le comportement effectif (moyenne spatiale) et les distributions des champs complets. On compare en particulier les comportements du matériau aux états irradié et non-irradié à la température de -90°C . L'analyse grain par grain fait l'objet de l'Annexe G.

10.2.1 Comportement effectif de l'agrégat

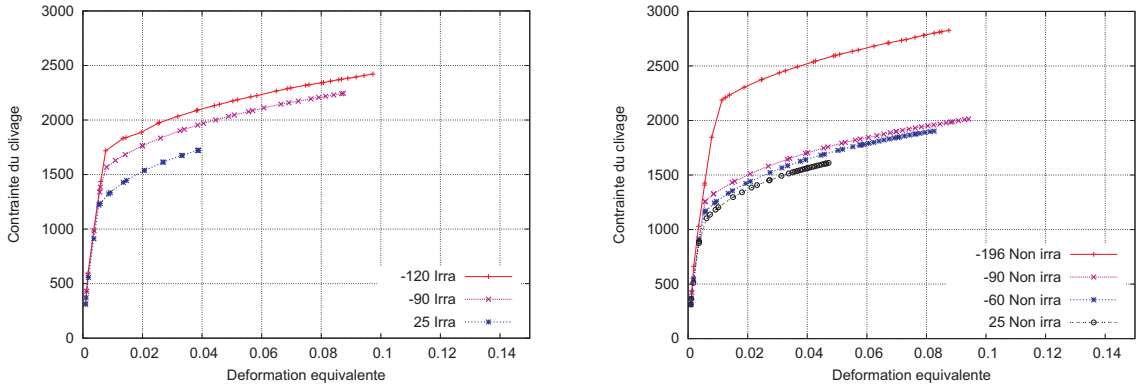
Tout d'abord, on vérifie avec les courbes d'évolution de la triaxialité χ de la figure 10.4 que les conditions aux limites déterminées avec l'agrégat simplifié (section 10.1.2) correspondent bien à un chargement où χ reste quasi-constant (entre 2 et $2,2$) au-delà d'une déformation axiale de l'ordre de 1%.

On présente ensuite sur les figures 10.5, 10.6, 10.7 les évolutions de la contrainte de clivage σ_{001}, de la contrainte principale maximale σ_{pI} et de la contrainte de von Mises σ_{mises}. On note en particulier des ordres de grandeur de 2 à $2,5$ fois plus élevés pour σ_{pI} et σ_{001} que pour σ_{mises}. Ceci est caractéristique d'un état de sollicitation à triaxialité de l'ordre de 2. On note par ailleurs que les courbes aux différentes températures semblent pouvoir se déduire les unes des autres par translation le long de l'axe des contraintes, ce qui n'est pas le cas des courbes de traction simple.



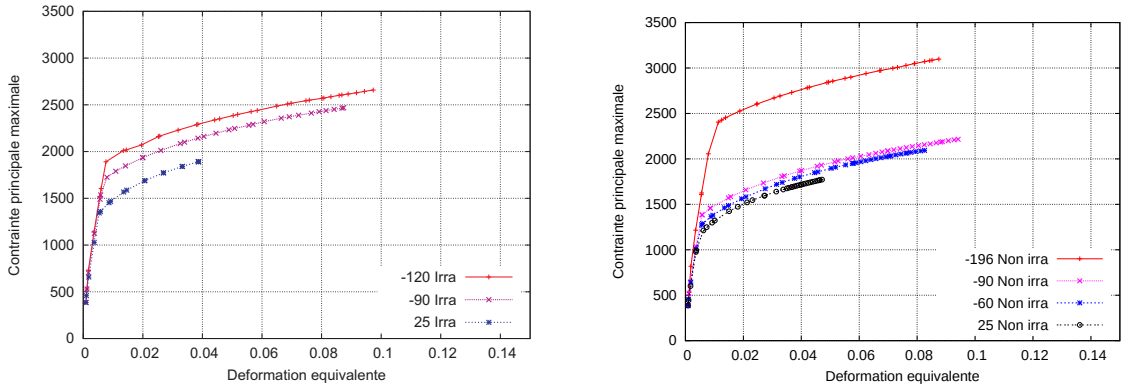
a) b)

FIG. *10.4. Triaxialité χ en fonction de la déformation axiale pour les matériaux irradié et non irradié aux différentes températures*



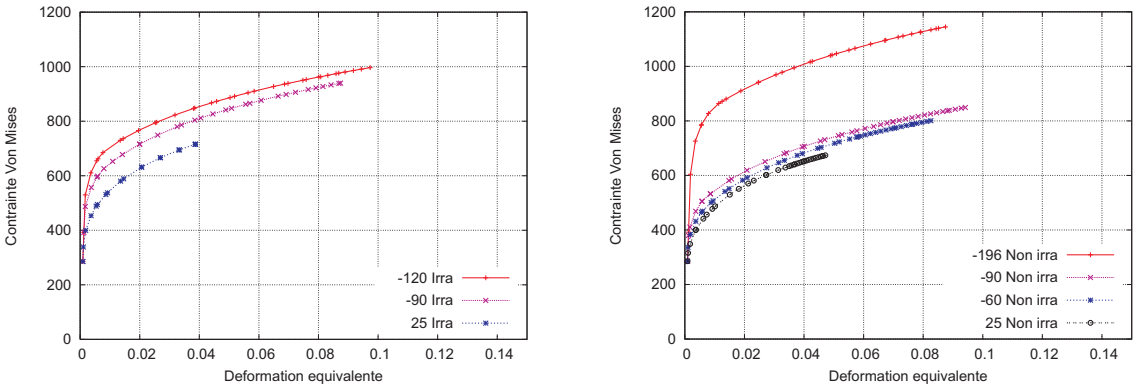
a) b)

FIG. *10.5. Contrainte de clivage $\sigma_c = \sigma_{001}$ en fonction de la déformation équivalente pour les matériaux irradié et non irradié aux différentes températures*



a) b)

FIG. *10.6. Contrainte principale maximale σ_{pI} en fonction de la déformation équivalente pour les matériaux irradié et non irradié aux différentes températures*



a) b)

FIG. *10.7. Contrainte de von Mises σ_{mises} en fonction de la déformation équivalente pour les matériaux irradié et non irradié aux différentes températures*

10.2.2 Tenseur de contrainte corrigée

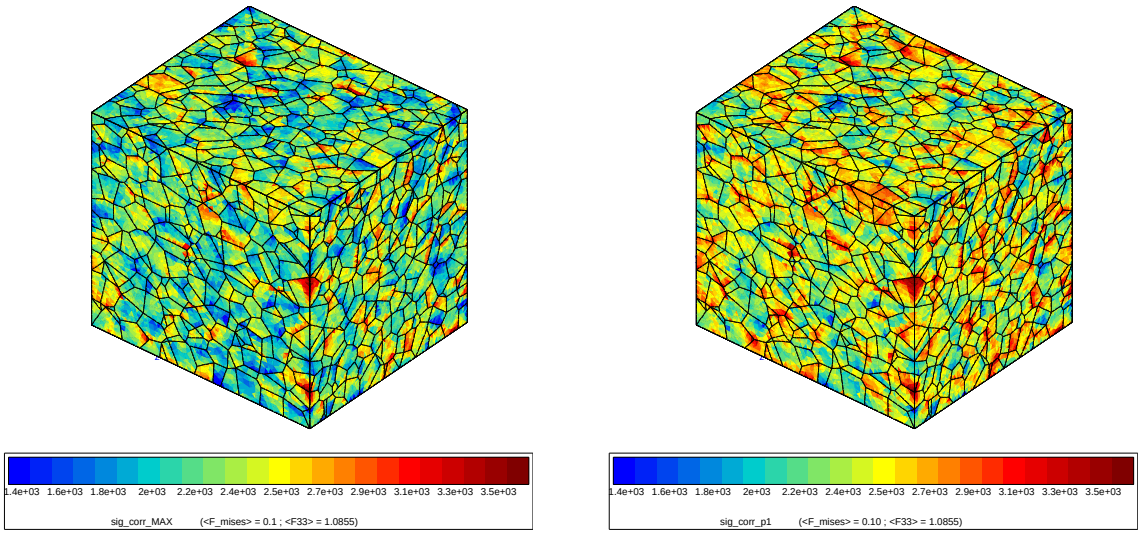
Le fait que l'on obtient des champs de contraintes perturbés est un problème connu dans la méthode des éléments finis, qui est largement discuté dans la littérature : dans les éléments subissant une importante déformation plastique, on observe une forte variation de contrainte d'un point d'intégration à l'autre. Cette variation est due à la fluctuation de pression dans les éléments, qui provient elle-même du fait que le volume change peu lorsque la déformation élastique devient faible par rapport à la déformation plastique. Ce problème peut-être résolu par l'utilisation d'éléments mixtes pression–déplacement, mais ceux-ci sont plus "chers" que les éléments isoparamétriques classiques. On se contente donc ici de régulariser le champ de contrainte obtenu en effectuant un post-traitement de la variation de pression : on affecte à chaque point de Gauss la moyenne de pression calculée sur l'élément auquel il appartient, $\overline{p}$, au lieu de celle qui provient du calcul direct, p. On calcule donc le champ régularisé, $\underset{\sim}{\sigma}^*$, comme :

$$\underset{\sim}{\sigma}^* = \underset{\sim}{\sigma} + \underset{\sim}{\mathbf{I}}(\overline{p} - p) \quad \text{avec} \quad p = \frac{Tr(\underset{\sim}{\sigma})}{3} \tag{10.3}$$

Toutes les analyses effectuées dans la suite de cette étude sont basées sur ce tenseur de contrainte, et non sur le tenseur initial $\underset{\sim}{\sigma}$.

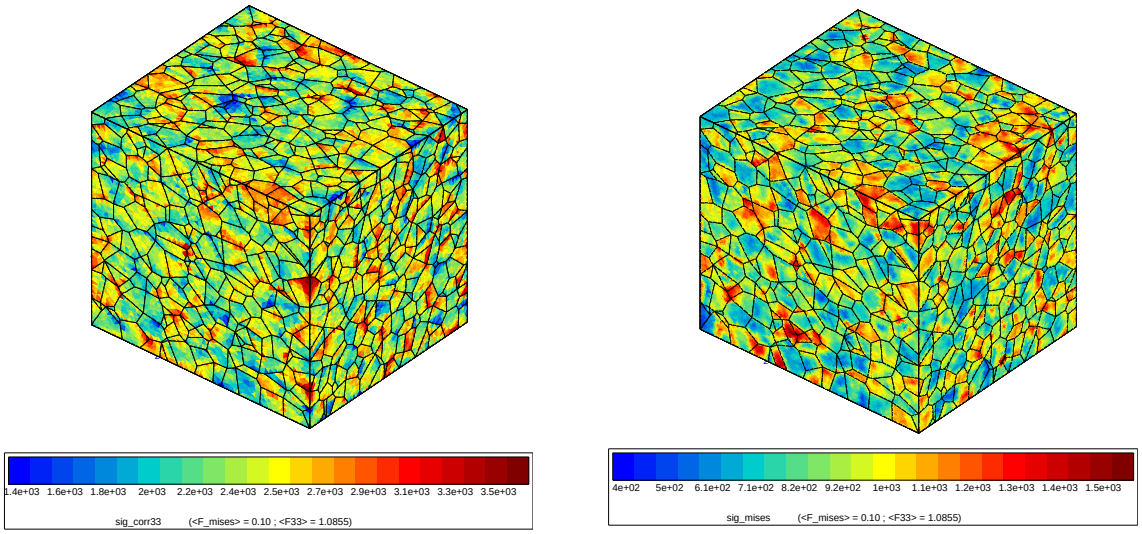
10.2.3 Analyse des champs locaux à la surface de l'agrégat

Les images de distribution des variables au 10% de déformation équivalente (matériau irradié, -90°C) montrent une forte hétérogénéité inter et intra paquets bainites.



a) b)

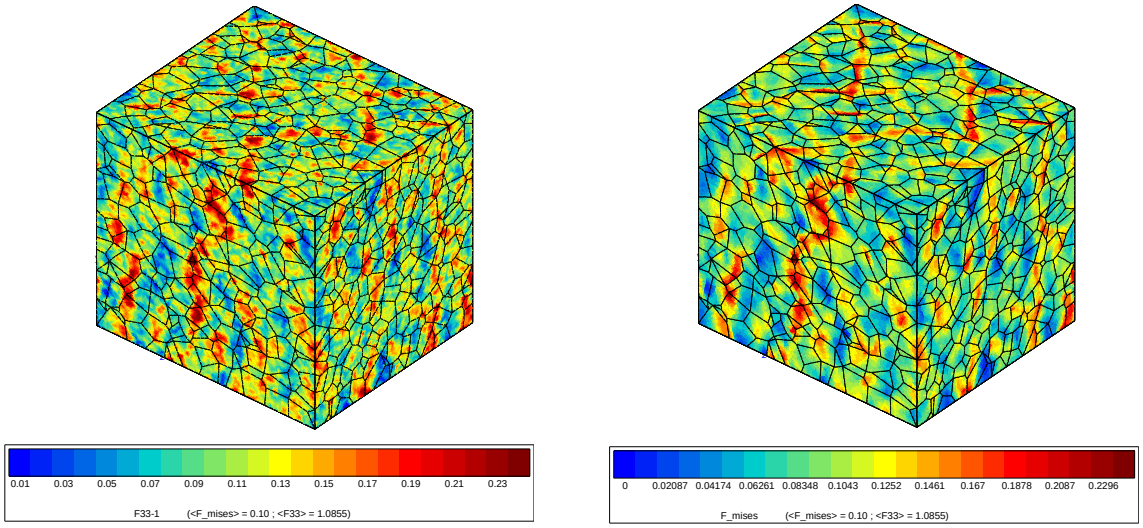
FIG. *10.8. Champs de contrainte. (a) Contrainte de clivage (σ_{001}) a) ; (b) contrainte principale maximale (σ_I)*



a) b)

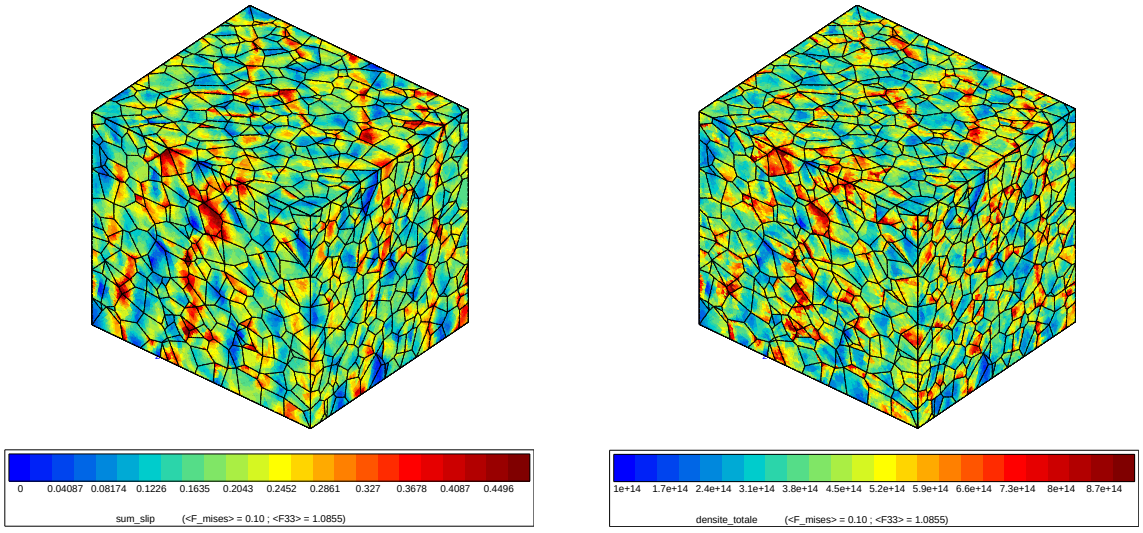
FIG. *10.9. Champs de contrainte. (a) Contrainte axiale 33 (σ_{33}) ; (b) contrainte de von Mises (σ_{mises})*

Les figures 10.8, 10.9 montrent que les contraintes les plus élevées se trouvent aux bords des paquets, et au niveau de points triples, zones de changement des orientations cristallines. Les contraintes les plus élevées sont distribuées dans l'agrégat. Certains paquets sont globalement plus chargés que leur voisinage. Il n'est pas rare que plusieurs paquets voisins présentent des niveaux de contrainte voisins, créant de ce fait des clusters en surcharge ou en sous-charge.



a) b)

FIG. *10.10. (a) Distribution de la déformation axiale 33 ($F33-1$) ; (b) distribution de la déformation équivalente (F_{mises})*



a) b)

FIG. *10.11. (a) Distribution de la somme des glissements sur tous les systèmes ($\gamma_{tot} = \Sigma_{i=1}^{24}\gamma_i$) ; (b) distribution de la densité de dislocations totale ($\rho_{tot} = \Sigma_{i=1}^{24}\rho_i$)*

Comme pour le cas des contraintes, les bords des paquets sont aussi les lieux où se concentrent les déformations les plus élevées (Fig. 10.10). Cependant, les déformations les plus élevées peuvent également se trouver au milieu des paquets, constituant des bandes de déformation. Les figures 10.10 illustrent ce phénomène.

La distribution de la somme des glissements sur tous les systèmes (Fig. 10.11 a), et celle de la densité totale (Fig. 10.11 b) ont logiquement la même allure que les distributions des déformations (Fig. 10.10). Malgré la relation très forte entre les dislocations et les glissements

plastiques, il y a une différence significative entre leurs distributions respectives. Ceci peut être expliqué par le fait que le glissement est associé au développement des dislocations, mais que, par ailleurs, une très forte quantité de dislocations finit par empêcher les glissements.

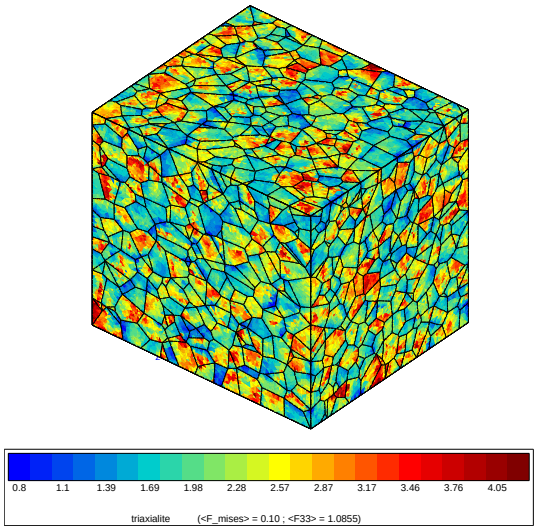


FIG. *10.12. Distribution de la triaxialité* χ

Pour la triaxialité il n'y a pas de zone privilégiée. Le maximum peut être trouvé n'importe où, aux bords ou au milieu des paquets (Fig. 10.12).

10.2.4 Distributions de champs complets

On compare dans cette section les distributions des variables suivantes à la température de -90°C :

- σ_c contrainte de clivage (contrainte projetée sur plan (001) maximale) ;
- σ_{pI} contrainte principale maximale ;
- σ_{mises} contrainte de von Mises ;
- F_{mises} déformation équivalente au sens de von Mises du tenseur des déformations ;
- γ_{tot} somme des glissements de tous les systèmes, $\gamma_{tot} = \sum_{i=1}^{24} |\gamma_i|$;
- ρ_{tot} somme des densités de dislocations de tous les systèmes, $\rho_{tot} = \sum_{i=1}^{24} \rho_i$;

On s'intéresse en particulier à l'effet de l'irradiation sur les distributions. Ces distributions sont décrites par les courbes de densité de probabilité (notée fréquence) dans des diagrammes, qui sont fournis en échelle décimale, mais aussi en échelle logarithmique, pour mieux mettre en évidence les *queues* de distribution associées aux valeurs élevées.

Les comparaisons sont effectuées pour un même niveau de déformation équivalente, à $2,5\%$, 5%, 7.5%, et 10% (figures 10.13, 10.14, 10.15, 10.16, 10.17, 10.18).

Les variables σ_c et σ_{pI} présentent des courbes de distribution quasiment symétriques par rapport au maximum de probabilité. Bien qu'elles y ressemblent, on ne peut pas dire qu'elles soient de type gaussienne car alors elles ne présenteraient pas de portions quasi-linéaires dans le diagramme en échelle logarithmique.

La distribution de la contrainte de von Mises selon une courbe à deux pics de probabilité est typique de la distribution de cette variable dans un agrégat polycristallin. Plusieurs travaux [Cordier et al., 2005, Osipov et al., 2008b, Osipov, 2007] ont référencé cette forme de distribution sans pour l'instant avoir apporté d'explication définitive à cette observation. Cette forme pourrait être significative d'une répartition des points de l'agrégat en deux catégories : l'une, correspondant aux points au voisinage des joints de grains, où σ_{mises} prend des valeurs traduisant les interactions avec les joints de grains ; l'autre, représentative du comportement au cœur des grains, où l'orientation cristallographique joue le rôle prédominant dans le comportement. L'effet des joints de grains dans un agrégat polycristallin a fait l'objet d'analyses sur la dispersion des variables en fonction de la distance aux joints de grains [Barbe et al., 2003, Cailletaud et al., 2003]. Elles montrent que, si les valeurs moyennées sur tous les points à une même distance d'un joint de grains ne semblent pas sensibles aux joint de grains, les dispersions le sont de manière importante. L'analyse devrait donc être poursuivie sur l'évolution des distributions en fonction de la distance au joint de grains. Ceci n'étant pas la préoccupation majeure de cette étude, nous n'effectuons pas cette analyse ici.

Concernant la variable de déformation équivalente, on constate que sa distribution dépend très peu de l'état d'irradiation. Ce n'est pas le cas de la somme des glissements et de la densité totale de dislocations. Deux états d'activité des systèmes de glissements peuvent donc conduire au même état de déformation équivalente. C'est la conséquence de la complexité du comportement dans un agrégat : les activités à l'échelle des systèmes de glissement ne se traduisent pas nécessairement par une déformation, certains glissements pouvant en compenser d'autres.

L'analyse porte ensuite sur les distributions déterminées pour une même contrainte principale maximale globale (2200 MPa) (figures 10.19, 10.20, 10.21, 10.22, 10.23, 10.24). L'état de contrainte est alors très peu affecté par l'état d'irradiation, alors que les variables de déformation ou d'activité sur les systèmes de glissement le sont, qualitativement comme quantitativement. De façon systématique, les distributions pour l'état non-irradié apparaissent beaucoup plus larges

que celles de l'état irradié. Les variables sont donc mieux réparties. Les champs observés pour le matériau irradié présentent une tendance à la localisation.

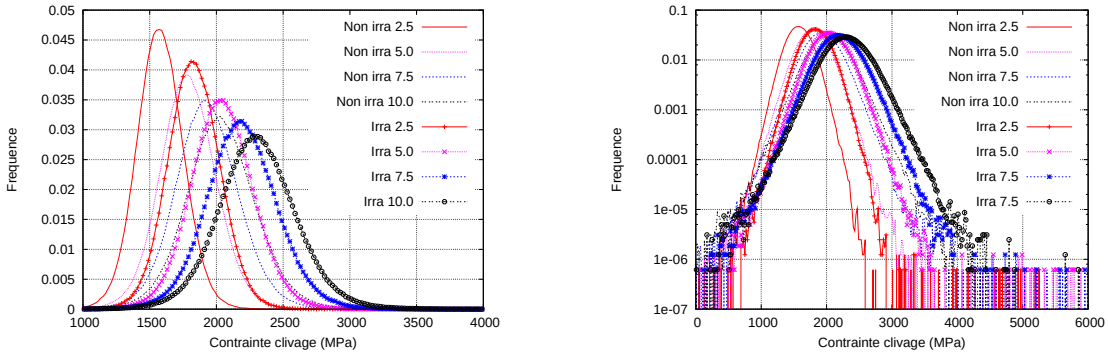


FIG. *10.13. Distributions de la contrainte de clivage (σ_c) pour des déformations équivalentes de* $2,5\%, 5,0\%, 7.5\%,$ *et* 10.0%

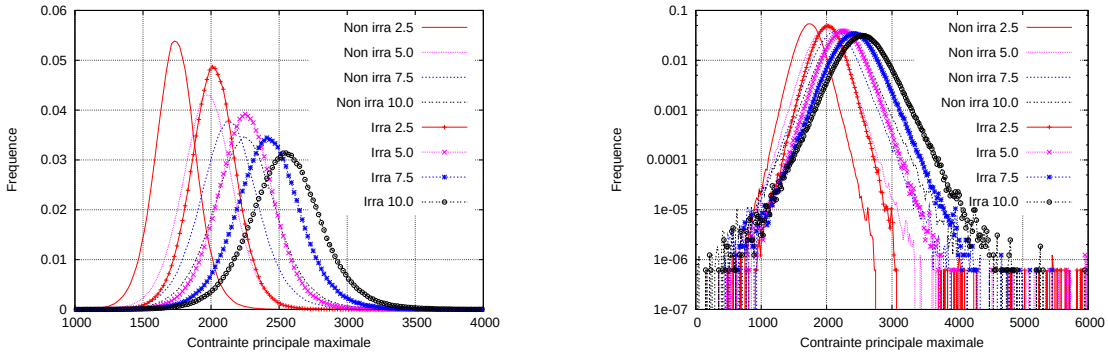


FIG. *10.14. Distributions de la contrainte principale maximale (σ_{pI}) pour des déformations équivalentes de* $2,5\%, 5,0\%, 7.5\%$ *et* 10.0%

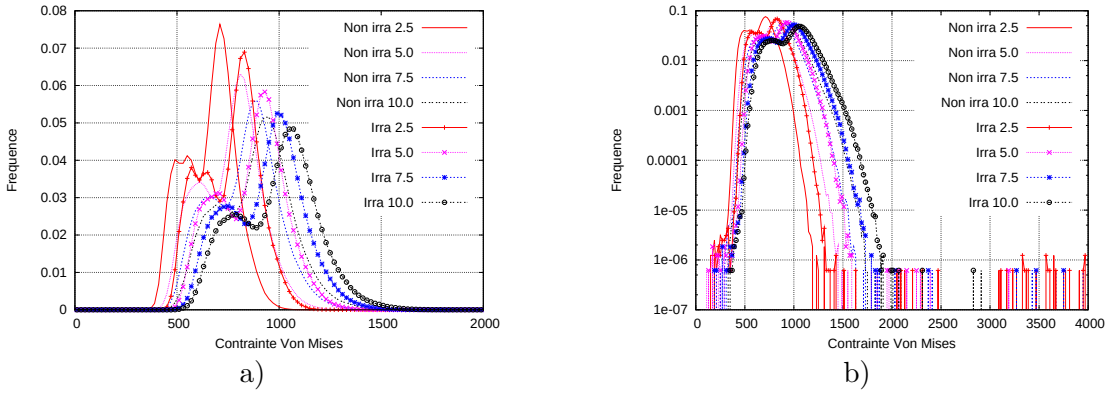
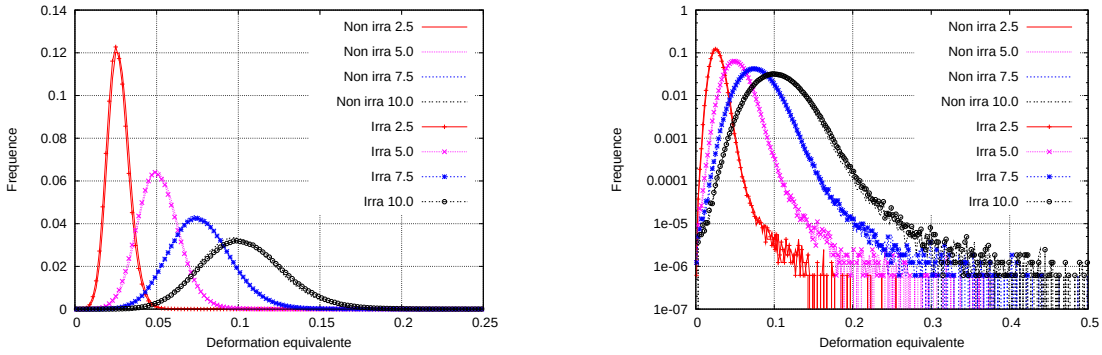
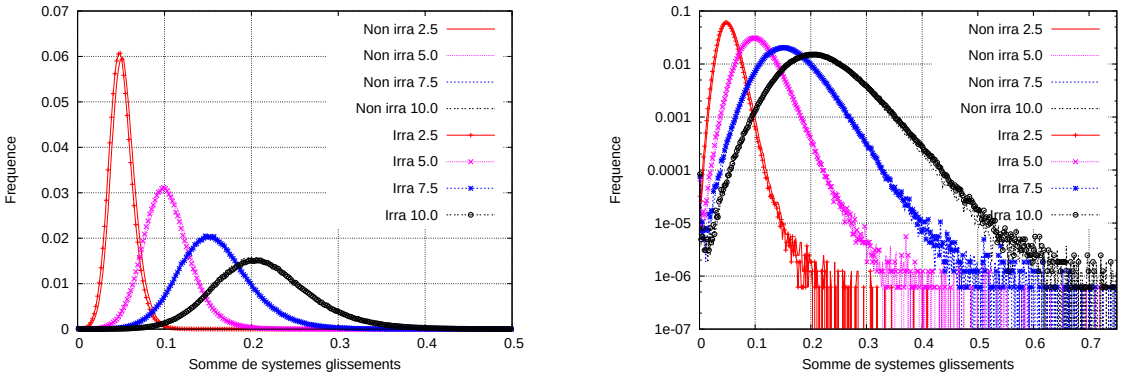


FIG. *10.15. Distributions de la contrainte de von Mises (σ_{mises}) pour des déformations équivalentes de* $2,5\%, 5,0\%, 7.5\%$ *et* 10.0%



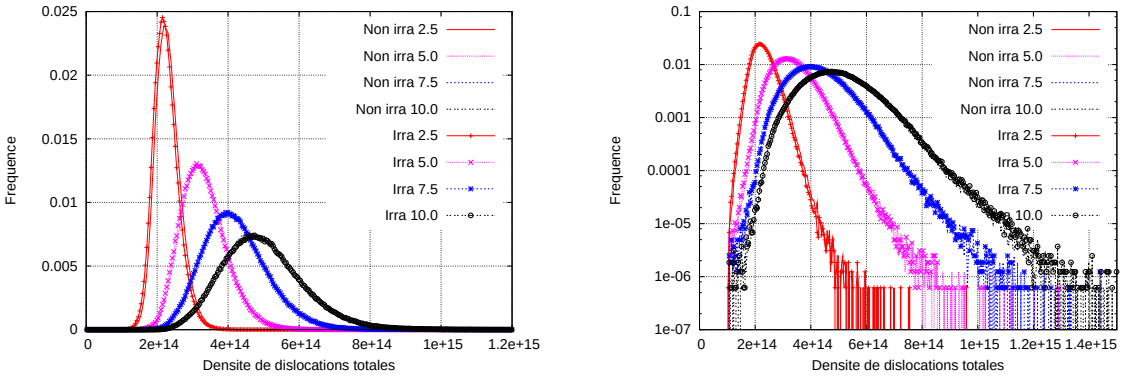
a) b)

FIG. *10.16. Distributions de la déformation équivalente au sens de von Mises (F_{mises}) pour des déformations équivalentes de* $2,5\%, 5,0\%, 7.5\%$ *et* 10.0%



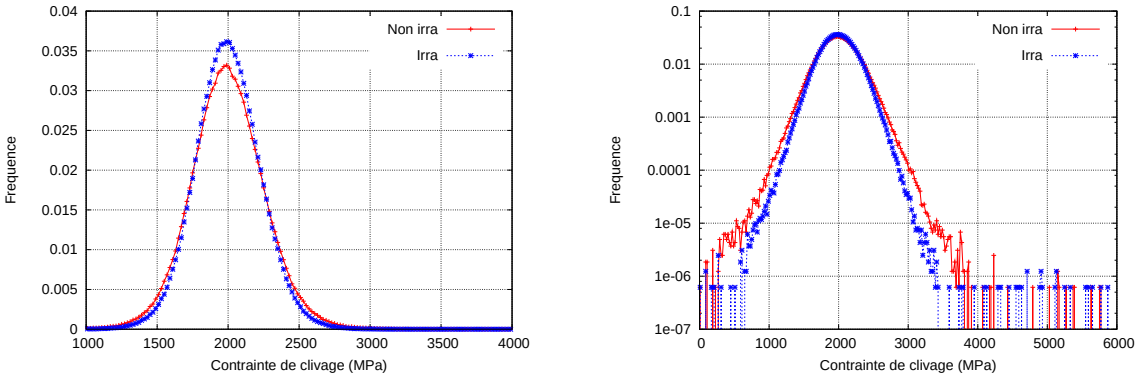
a) b)

FIG. *10.17. Distributions de la somme des glissements (γ_{tot}) pour des déformations équivalentes de* $2,5\%, 5,0\%, 7.5\%$ *et* 10.0%



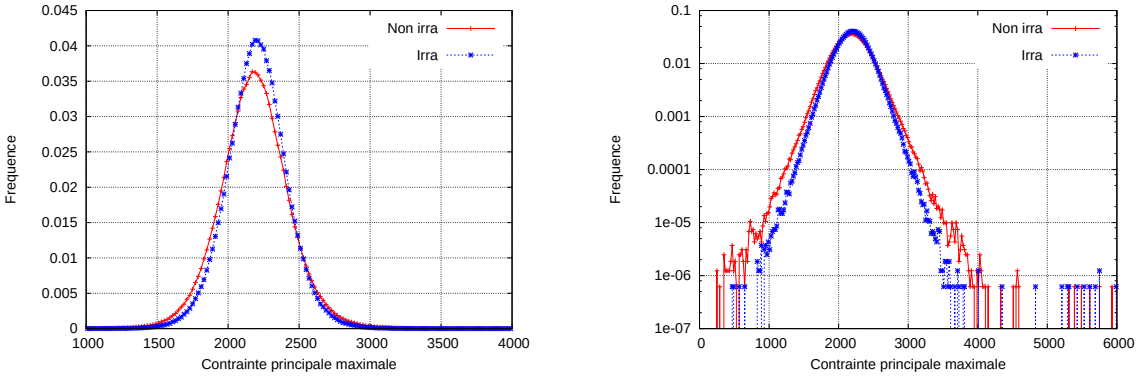
a) b)

FIG. *10.18. Distributions de la densité de dislocations totale (ρ_{tot}) pour des déformations équivalentes de* $2,5\%, 5,0\%, 7.5\%$ *et* 10.0%



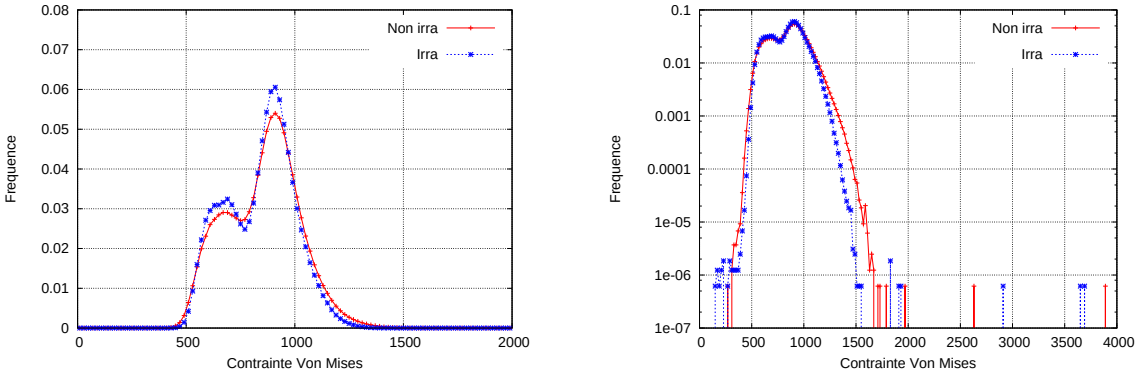
a) b)

FIG. *10.19. Distributions de la contrainte clivage (σ_c) pour une même contrainte principale maximale moyenne (2200 MPa)*



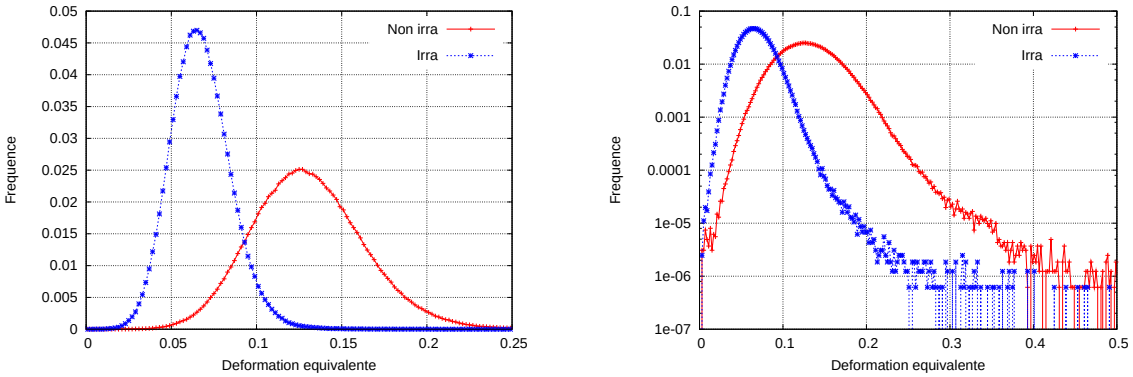
a) b)

FIG. *10.20. Distributions de la contrainte principale maximale (σ_{pI}) pour une même contrainte principale maximale moyenne (2200 MPa)*



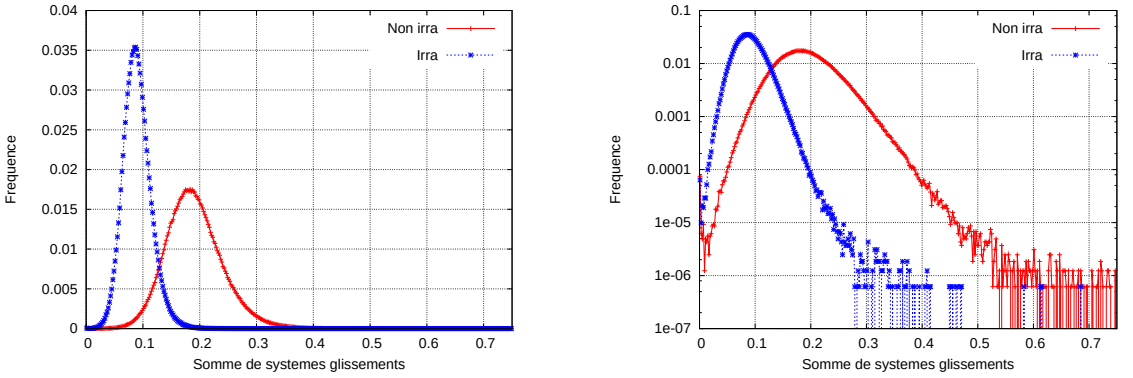
a) b)

FIG. *10.21. Distributions de la contrainte de von Mises (σ_{mises}) pour une même contrainte principale maximale moyenne (2200 MPa)*



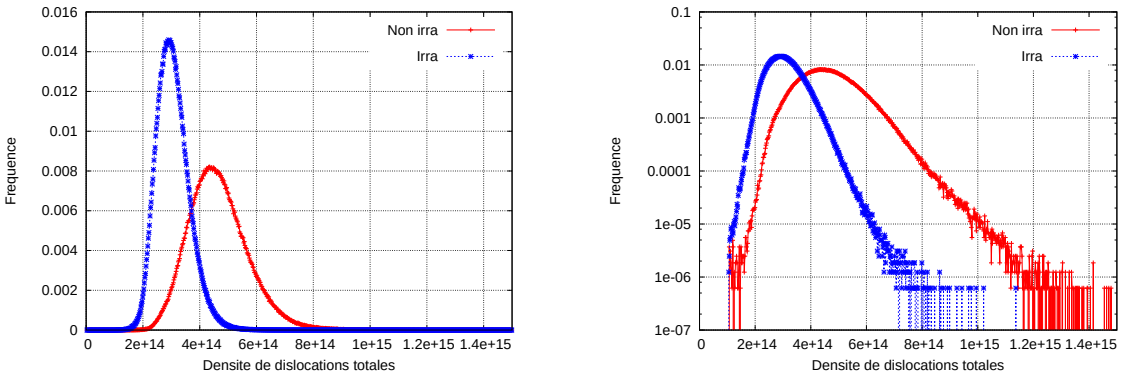
a) b)

FIG. *10.22. Distributions de la déformation équivalente au sens de von Mises (F_{mises}) pour une même contrainte principale maximale moyenne (2200 MPa)*



a) b)

FIG. *10.23. Distributions de la somme des glissements (γ_{tot}) pour une même contrainte principale maximale moyenne (2200 MPa)*

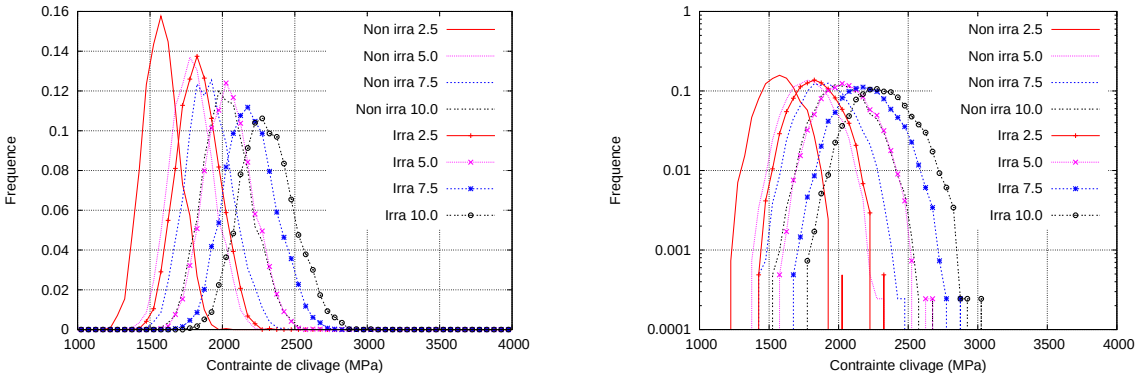


a) b)

FIG. *10.24. Distributions de la densité de dislocations totale (ρ_{tot}) pour une même contrainte principale maximale moyenne (2200 MPa)*

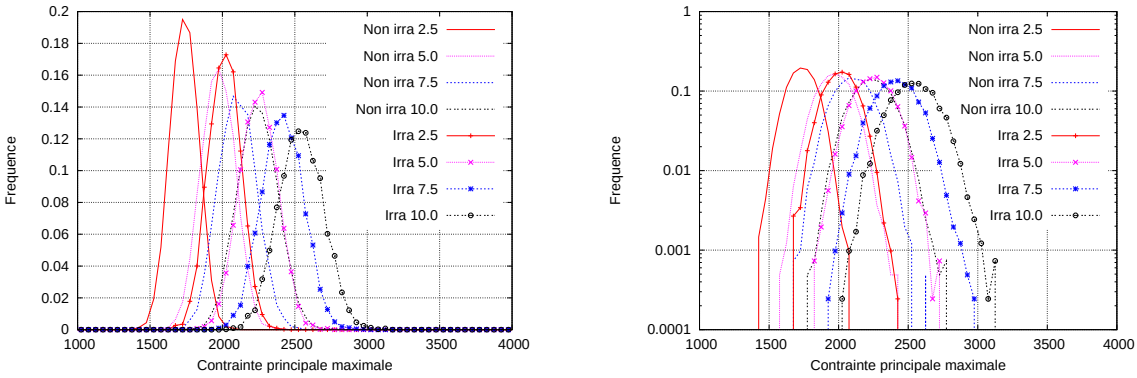
10.3 Distribution de champs moyennés sur chaque paquet bainitique

On compare aussi, pour les matériaux irradié et non-irradié à -90°C , les distributions de champs des variables moyennés par paquet bainitique.



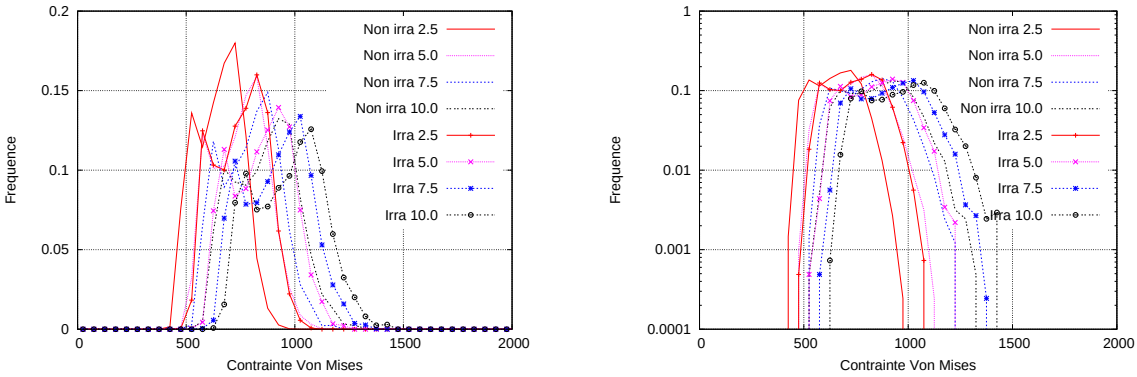
a) b)

FIG. *10.25. Distributions de la contrainte de clivage (σ_c) aux déformations équivalentes de* $2,5\%, 5,0\%, 7.5\%$, *et* 10.0%



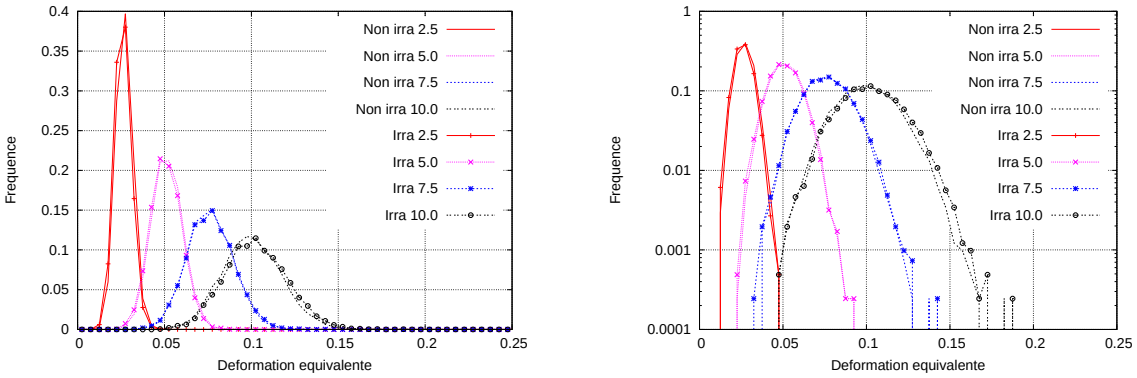
a) b)

FIG. *10.26. Distributions de la contrainte principale maximale (σ_{pI}) aux déformations équivalentes de* $2,5\%, 5,0\%, 7.5\%$ *et* 10.0%



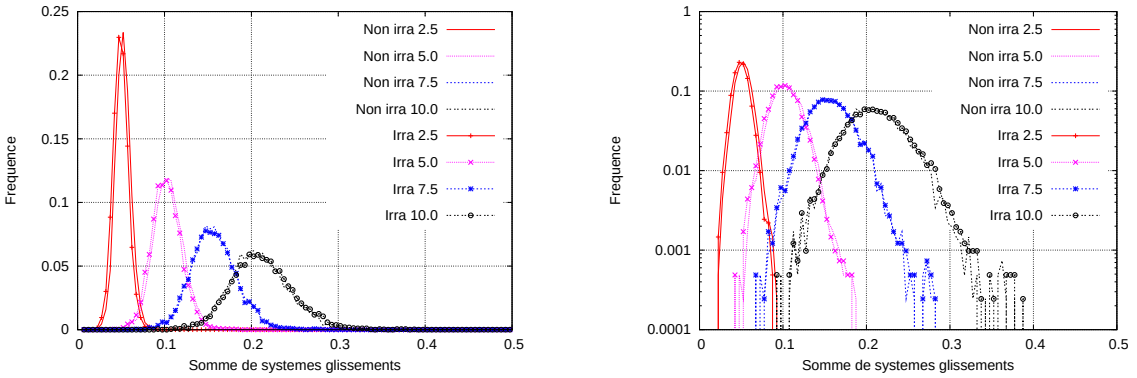
a) b)

FIG. *10.27. Distributions de la contrainte von Mises (σ_{mises}) aux déformations équivalentes de* $2,5\%, 5,0\%, 7.5\%$ *et* 10.0%



a) b)

FIG. *10.28. Distributions de la déformation équivalente au sens de von Mises (F_{mises}) aux déformations équivalentes de* $2,5\%, 5,0\%, 7.5\%$ *et* 10.0%



a) b)

FIG. *10.29. Distributions de la somme des glissements (γ_{tot}) aux déformations équivalentes de* $2,5\%, 5,0\%, 7.5\%$ *et* 10.0%

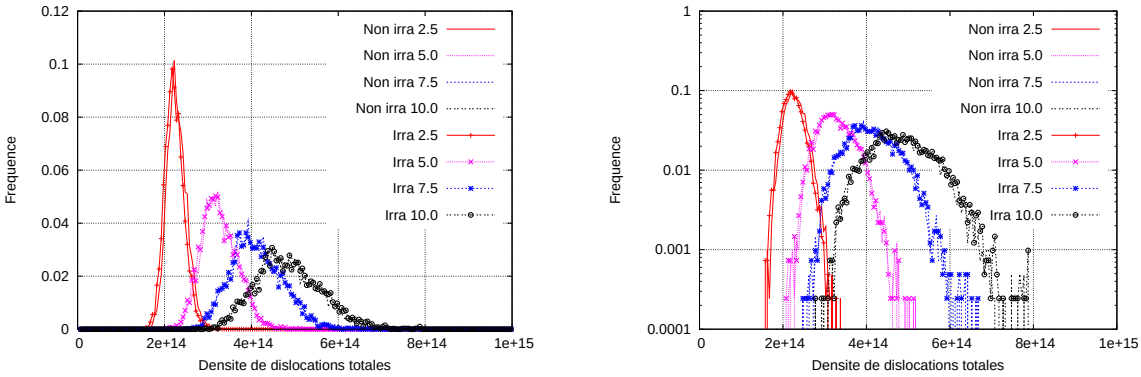


FIG. *10.30. Distributions de la densité de dislocations totale (ρ_{tot}) aux déformations équivalentes de $2,5\%, 5,0\%, 7.5\%$ et 10.0%*

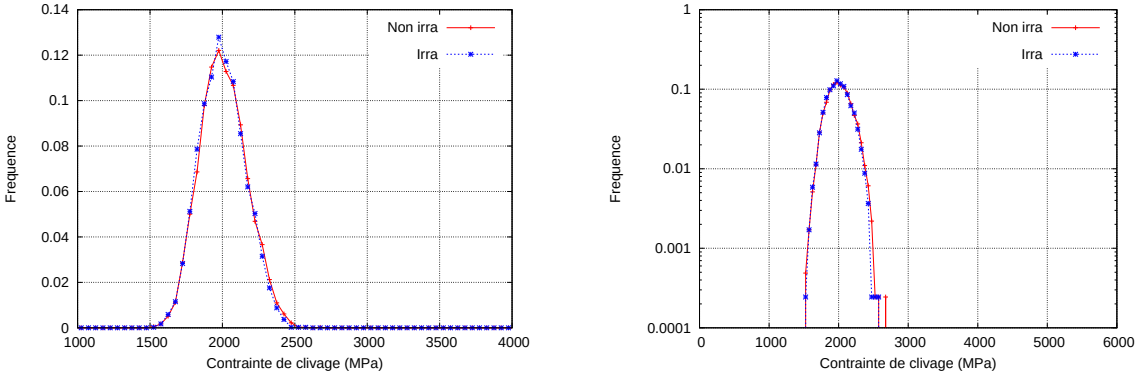


FIG. *10.31. Distributions de la contrainte clivage (σ_c) pour une même contrainte principale maximale moyenne (2200 MPa)*

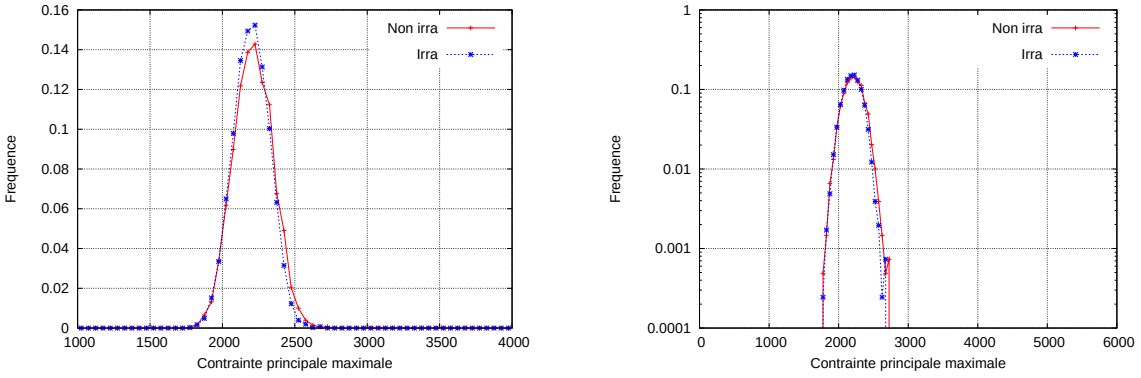
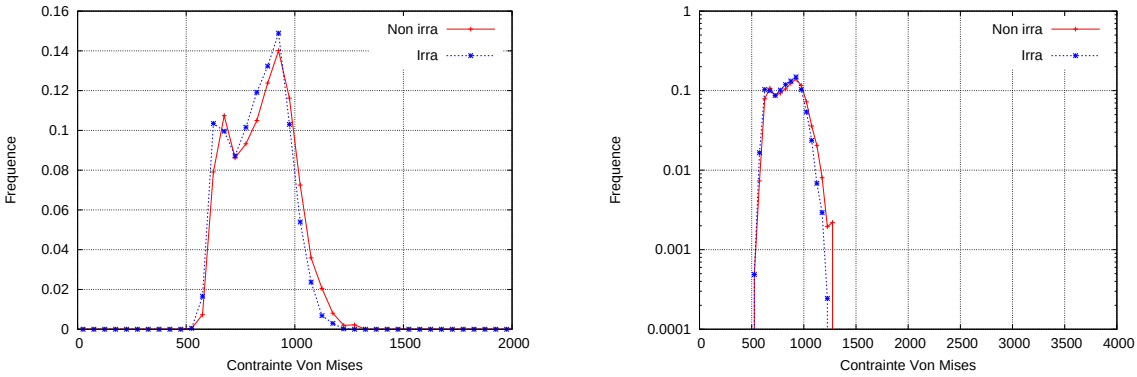
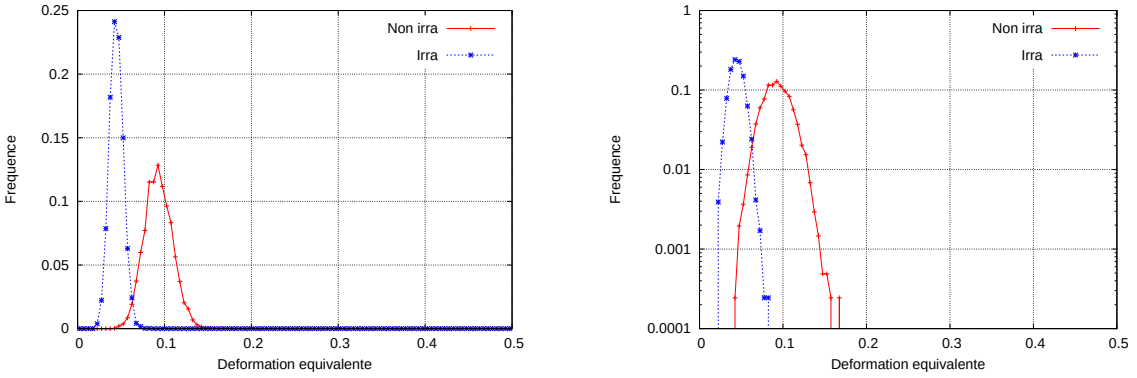


FIG. *10.32. Distributions de la contrainte principale maximale (σ_{pI}) pour une même contrainte principale maximale moyenne (2200 MPa)*



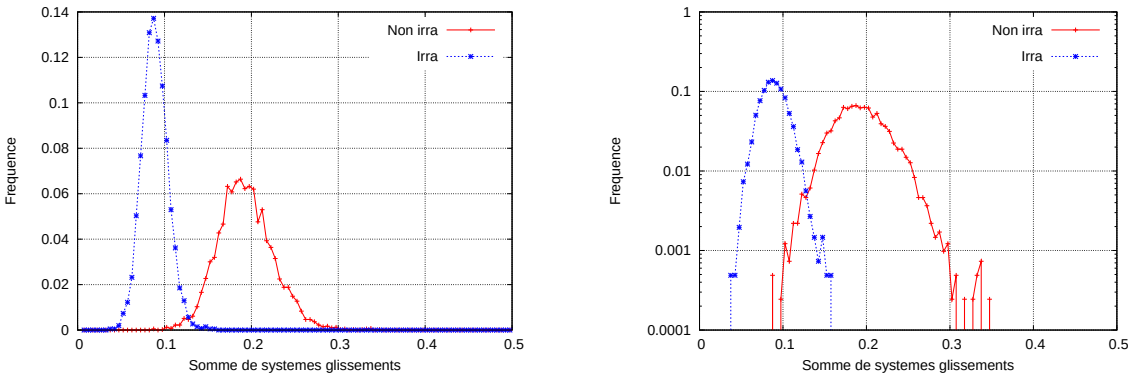
a) b)

FIG. *10.33. Distributions de la contrainte de von Mises (σ_{mises}) pour une même contrainte principale maximale moyenne (2200 MPa)*



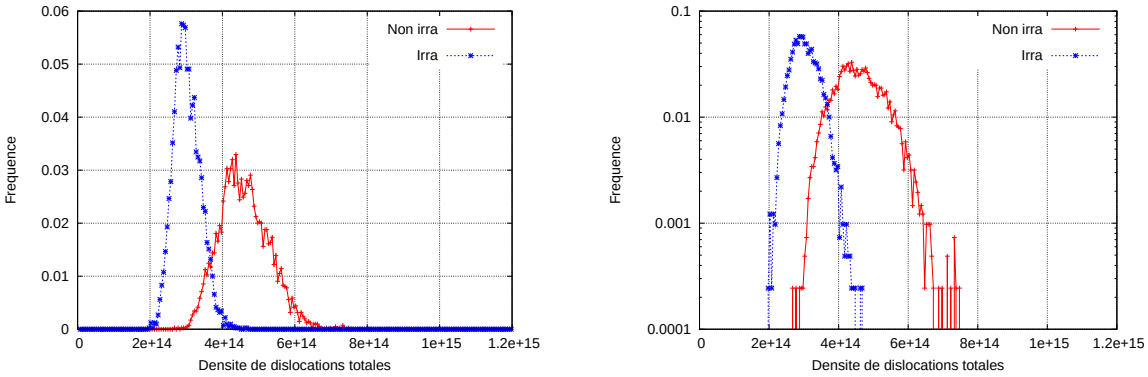
a) b)

FIG. *10.34. Distributions de la déformation équivalente au sens de von Mises F_{mises} pour une même contrainte principale maximale moyenne (2200 MPa)*



a) b)

FIG. *10.35. Distributions de la somme des glissements (γ_{tot}) pour une même contrainte principale maximale moyenne (2200 MPa)*



a) b)

FIG. *10.36. Distributions de la densité de dislocations totale (ρ_{tot}) pour une même contrainte principale maximale moyenne (2200 MPa)*

10.4 Conclusions

Notre méthode originale d'application des conditions aux limites nous a permis d'effectuer des chargements à triaxialité imposée de 2. Nous pouvons créer un état de déformation plane avec n'importe quelle triaxialité. Les résultats montrent des distributions classiques pour les contraintes (qui respectent les domaines) et les déformations (qui créent des bandes traversant ceux-ci). Au fur et à mesure que le chargement augmente, la dispersion des contraintes augmente. Cette augmentation de dispersion est encore plus sensible pour la déformation, pour laquelle de larges zones peuvent rester pratiquement sans déformation plastique alors que la déformation s'intensifie dans les bandes.

Pour ce qui concerne la comparaison entre matériau non irradié et irradié, on observe une bien plus grande localisation de déformation pour ce dernier.

Chapitre 11

Approche micromécanique locale de la rupture

Ce chapitre présente la détermination, pour chaque température et chaque état d'irradiation, de la probabilité de rupture de l'agrégat lorsqu'il est sollicité en déformation plane avec une triaxialité de 2. Les résultats généraux pour cet état de sollicitation ont été exposés au chapitre 10. Ces résultats sont maintenant exploités en généralisant l'approche micromécanique locale de la rupture proposée dans la thèse de Nikolay Osipov [Osipov, 2007].

La section 11.1 rappelle la formulation du calcul de la probabilité de rupture suivant le concept du maillon le plus faible. L'application de cette approche peut être faite en faisant différents choix concernant les variables d'entrée du modèle. L'une des extrêmes consiste à travailler sur le champ aux point de Gauss, l'autre sur le champ moyenné au niveau du maillage complet. La première solution n'est pas raisonnable, car la solution est influencée dans ce cas par quelques points qui ont des valeurs peu physiques en raison de configurations locales du maillage. La seconde conduit à un effet de lissage trop important, qui n'est pas non plus très satisfaisant. C'est pourquoi nous avons plutôt considéré que l'échelle adaptée pour l'approche locale est celle du grain, et, en section 11.2, les probabilités de rupture sont obtenues en considérant le grain primaire comme maillon faible (on opère donc sur les champs moyennés par grains). Les résultats sont présentées pour différentes températures, pour chaque matériau (irradié ou non). On a effectué les comparaisons pour quatre états de déformation équivalente ($2,5\%$, 5%, $7,5\%$ et 10%), et pour un même état de contrainte principale.
Il peut être légitime également de se placer à l'échelle du paquet, c'est pourquoi une comparaison est faite en considérant des champs moyennés par paquet comme variable d'entrée.

Il existe enfin une solution intermédiaire, consistant à considérer le paquet comme élément représentatif, mais en ne lui associant pas la règle du maillon le plus faible. On étudie ainsi en section 11.3, une approche de type "multi-barrières", dans laquelle on calcule la rupture par paquet, mais où un grain peut survivre, avec un ou plusieurs paquets rompus.

11.1 Formulation de l'approche

Probabilité de rupture de l'agrégat. Soit p la probabilité de rupture de l'agrégat. Le volume total de l'agrégat étant divisé en N_{sd} sous-domaines, il suffit, selon la théorie du maillon le plus faible, qu'un seul de ces sous-domaines soit rompu pour entraîner la rupture complète de

l'agrégat. p_i étant la probabilité de rupture du sous-domaine i, $\prod_{i=1}^{N_{sd}}(1-p_i)$ est la probabilité qu'aucun sous-domaine ne soit rompu. Il s'ensuit l'expression de p fournie par l'équation 11.1 :

$$p = 1 - \prod_{i=1}^{N_{sd}}(1-p_i) \tag{11.1}$$

La détermination des probabilités de rupture des sous-domaines est basée sur différentes hypothèses conformes aux analyses expérimentales sur les mécanismes de la rupture par clivage, hypothèses reprises des travaux de Mathieu et Osipov [Mathieu, 2006a, Osipov, 2007] et résumées ci-après.

Contrainte critique de Griffith On considère que la rupture par clivage ne peut avoir lieu que dans des plans cristallographiques de la famille {001} et que, suivant le critère de Griffith, elle se met en œuvre si la contrainte locale projetée sur ce plan (σ_{loc}) dépasse la contrainte critique de Griffith σ_G définie par l'équation 11.2.

$$\sigma_G = \frac{1}{2}\left[\frac{\pi E \gamma_R}{(1-\upsilon^2)\,a}\right]^{1/2} \tag{11.2}$$

Cette équation présente l'intérêt de relier explicitement la contrainte critique au rayon a de la fissure microscopique à l'origine de la rupture. Considérant que les fissures microscopiques sont directement issues de la rupture des petits carbures, on peut, en utilisant la loi de distribution des tailles de carbures proposée par Ortner [Ortner et al., 2005] (cf. section 5.6.3), définir une distribution de la contrainte critique de Griffith au sein de l'agrégat. Les distributions obtenues dans chaque grain primaire sont fournies sur les figures 11.7 et 11.8 en termes de densités de probabilité $\rho(\sigma_G)$. Elles ont été calculées en imposant une taille maximale de carbure ($a_{max} = 2\mu m$) et en retenant, en chaque point d'intégration de l'agrégat, la taille maximale parmi toutes celles issue d'un tirage aléatoire respectant la distribution d'Ortner.

Les autres paramètres intervenant dans l'expression de la contrainte de Griffith sont le module d'Young E, le coefficient de Poisson ν et γ_R, l'énergie de surface (en J/m^2), c'est-à-dire l'énergie nécessaire à la formation d'une nouvelle surface de rupture. Ce paramètre reste difficile à déterminer de façon précise à partir d'observations expérimentales. On s'en tiendra ici à des valeurs typiques (2, 7 et $12 J/m^2$) ainsi qu'à la proposition de Mathieu [Mathieu, 2006a] qui permet de prendre en compte l'effet de la température T : $\gamma_R = 2.15 + 1.77e^{0.0104T}$.

Probabilité de rupture d'un sous-domaine $\rho(\sigma_G)$ étant la densité de probabilité du paramètre σ_G tel qu'expliqué ci-dessus, $\rho(\sigma_{G0})d\sigma_G$ est la probabilité de trouver σ_G dans l'intervalle $[\sigma_{G0}, \sigma_{G0} + d\sigma_G]$. σ_{loc} étant la contrainte locale projetée sur le plan cristallographique {001}, on note $p(\sigma_{loc} > \sigma_G)$ la probabilité que la contrainte locale projetée soit supérieure à σ_G.

La probabilité de rupture pour un σ_{G0} donné dépend à la fois de la probabilité $p(\sigma_{loc} > \sigma_{G0})$ et de trouver σ_G dans l'intervalle $[\sigma_{G0}, \sigma_{G0} + d\sigma_G]$. Elle s'exprime donc par :

$$p(\sigma_{loc} > \sigma_{G0})\rho(\sigma_{G0})d\sigma_G \tag{11.3}$$

La probabilité de rupture p_i pour toutes les valeurs possibles de σ_G prises dans un sous-domaine i devient donc :

$$p_i = \int_0^\infty p(\sigma_{loc} > \sigma_G)\rho(\sigma_G)d\sigma_G \tag{11.4}$$

Cette expression est utilisée dans sa forme discrétisée sur tous les points d'intégration du sous-domaine i. Il faut donc pour cela disposer de champs de σ_{loc} (résultats de calcul) et de champs de σ_G (hypothèses sur la santé du matériau) qui soient cohérents. Choisir une approche au niveau de chaque point de Gauss nécessite de définir également une valeur par point de Gauss, alors que l'approche moyenne sur la maillage complet, qui rejoint l'approche locale macroscopique classique, ne nécessite qu'une seule valeur de σ_G. Notre approche locale micromécanique va travailler au niveau des grains et/ou des paquets. Elle utilisera des champs locaux moyennés, et elle permettra l'étude de la rupture à une échelle bien inférieure à celle de l'élément de volume. La généralisation proposée dans ce travail permet de déterminer la probabilité de rupture selon plusieurs scénarios : rupture due à 1 sous-domaine, 2 sous-domaines, 3 sous-domaines, etc, un sous-domaine pouvant représenter un paquet bainitique, ou plusieurs paquets bainitiques d'un même grain primaire ou encore un grain primaire.

11.2 Application de la formulation

Effet du choix de type de sous-domaine Afin de mettre en évidence l'effet du choix de type de sous-domaine responsable de la rupture, les probabilités de rupture de l'agrégat causées par la rupture d'un grain primaire seul sont comparées à celles qui sont causées par la rupture d'un paquet bainitique seul pour le matériau non irradié à la température de -90°C et pour $\gamma_R = 14J/m^2$. Les résultats sont fournis dans le tableau 11.1 aux différents niveaux de référence de la déformation.

On exprime la probabilité de rupture de l'agrégat causée par la rupture d'un seul paquet bainitique comme :

$$p = 1 - \prod_{i=1}^{4096}(1 - p_{paquet_i}) \quad \text{avec} \quad p_{paquet_i} = \int_0^{\infty} p(\sigma_{paquet_{loc}} > \sigma_G)\rho_{paquet}(\sigma_G)d\sigma_G \tag{11.5}$$

Dans le cas de la rupture causée par un grain primaire, on aura une autre moyenne :

$$p = 1 - \prod_{i=1}^{80}(1 - p_{grain_i}) \quad \text{avec} \quad p_{grain_i} = \int_0^{\infty} p(\sigma_{grain_{loc}} > \sigma_G)\rho_{grain}(\sigma_G)d\sigma_G \tag{11.6}$$

Déformation équivalente (%)	Grains primaires	Paquets
2.5	6.654e-4	0.91839368
5.0	2.906e-3	0.99958659
7.5	5.626e-3	0.99999964

TAB. *11.1. Probabilité de rupture de l'agrégat en considérant respectivement les grains primaires ou les paquets bainitiques comme maillon faibles (matériau non irradié, -90° C, $\gamma_R = 14J/m^2$)*

Cas où le maillon faible est un grain primaire : résultats complets. La formulation de la section précédente est maintenant appliquée pour les deux matériaux (irradié ou non) à

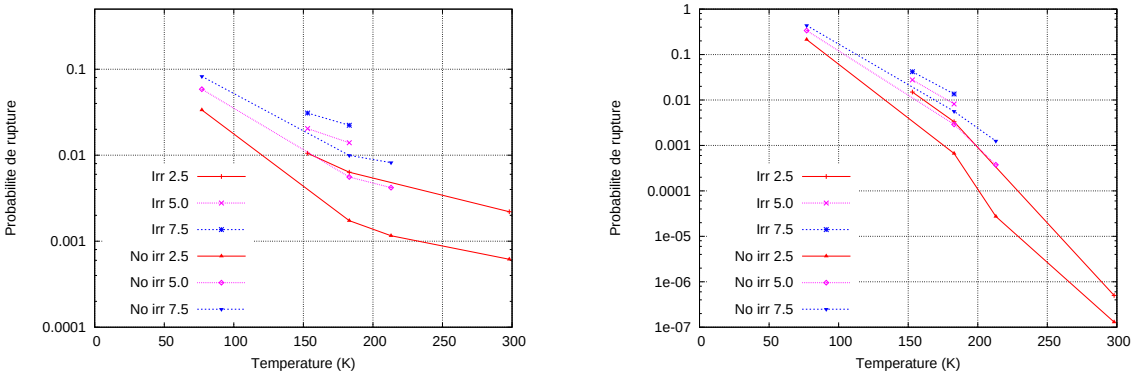


FIG. *11.2. Probabilité de rupture des matériaux irradié et non irradié avec* $\gamma_R = 12Jm^{-2}$ *a) et* $\gamma_R = 2.15 + 1.77e^{0.0104T}$ *b), pour 2.5%, 5.0%, 7.5% déformation équivalente*

toutes les températures et pour différents états de sollicitation. Les grains primaires sont choisis comme maillons de la chaine si bien que la rupture d'un seul est supposée entraîner la rupture de l'ensemble.

Trois valeurs typiques de γ_R ont tout d'abord été retenues : $2Jm^{-2}$, $7Jm^{-2}$ (Fig. 11.1), (Fig. 11.3) $12Jm^{-2}$ (Fig. 11.2a), (Fig. 11.4a). Puis sur la fig. (Fig. 11.2b), (Fig. 11.4b), on présente le cas où γ_R varie en fonction de la température selon la relation proposée dans les travaux de Mathieu [Mathieu, 2006a] : $\gamma_R = 2.15 + 1.77e^{0.0104T}$.

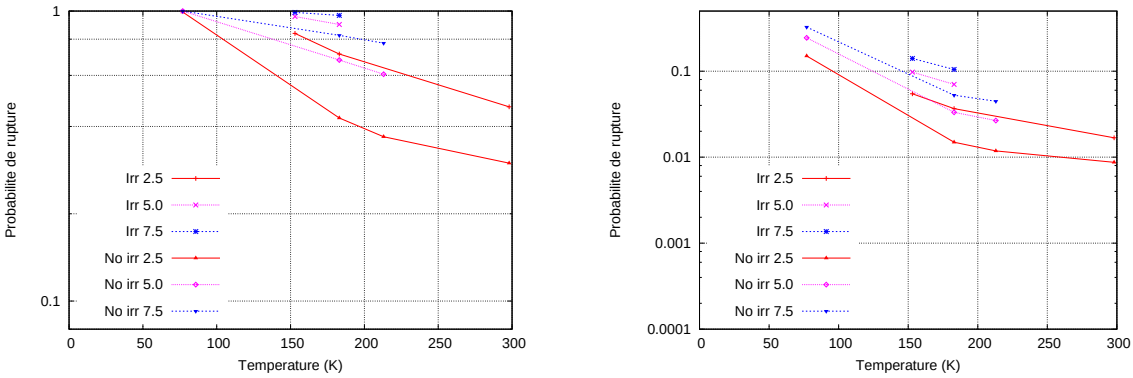
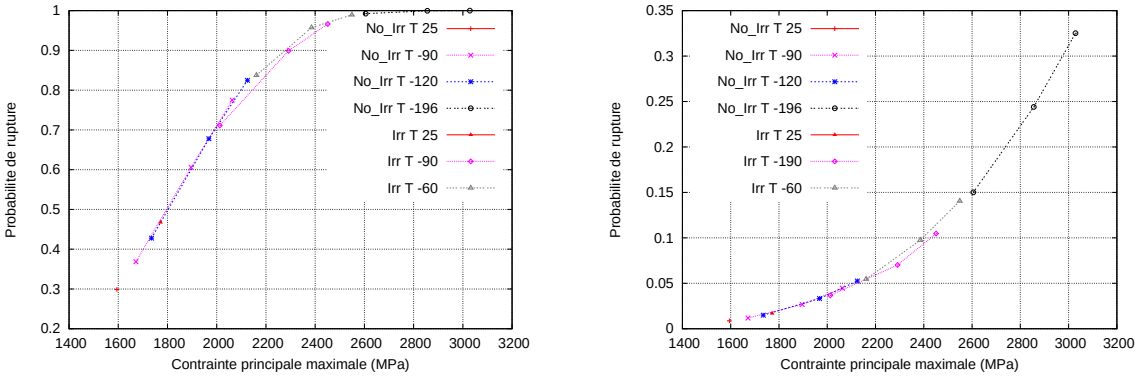


FIG. *11.1. Probabilité de rupture des matériaux irradié et non irradié avec* $\gamma_R = 2Jm^{-2}$ *a) et* $\gamma_R = 7Jm^{-2}$ *b), pour 2.5%, 5.0%, 7.5% déformation équivalente*

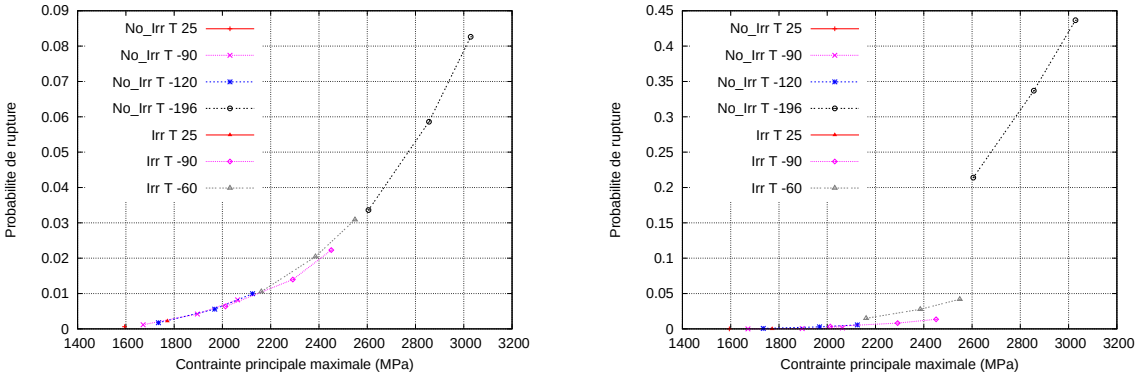
De façon générale, on observe sur les (Fig. 11.1, Fig. 11.2) que, pour un même niveau de déformation, les matériaux irradiés ont une probabilité de rupture plus importante que les matériaux non irradiés.

Il est intéressant de noter sur les (Fig. 11.3, Fig. 11.4, Fig. 11.5) que la probabilité de rupture dépend principalement de la contrainte principale maximale et de l'énergie de surface. Elle ne distingue pas matériau irradié et matériau non irradié. Quand l'énergie de surface est constante, la courbe de probabilité de rupture est une courbe continue, au contraire si l'énergie de surface est une fonction de la température la courbe de probabilité est une courbe en escalier.



a) b)

FIG. *11.3. Probabilité de rupture des matériaux irradié et non irradié avec* $\gamma_R = 2Jm^{-2}$ *a) et* $\gamma_R = 7Jm^{-2}$ *b), en fonction de contrainte principale maximale*



a) b)

FIG. *11.4. Probabilité de rupture des matériaux irradié et non irradié avec* $\gamma_R = 12Jm^{-2}$ *a) et* $\gamma_R = 2.15 + 1.77e^{0.0104T}$ *b), en fonction de contrainte principale maximale*

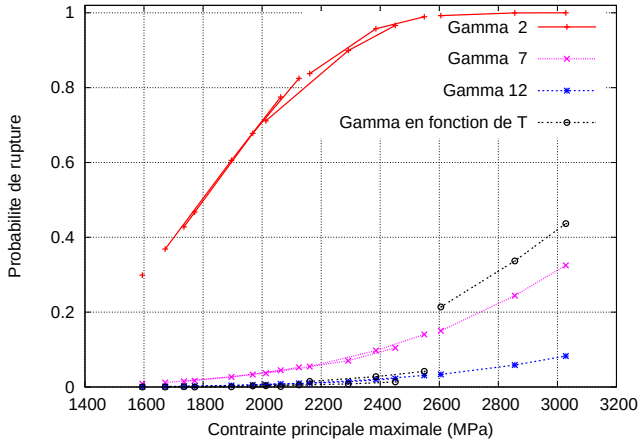


FIG. *11.5. Probabilité de rupture des matériaux irradié et non irradié avec* $\gamma_R = 2Jm^{-2}$, $\gamma_R = 7Jm^{-2}$, $\gamma_R = 12Jm^{-2}$ *et* $\gamma_R = 2.15+1.77e^{0.0104T}$ *en fonction de contrainte principale maximale*

11.3 Notion de rupture complète par micro-ruptures multiples ("multi-barrières")

L'approche à maillon faible considère que la rupture d'un seul sous-domaine conduit à la rupture complète de l'agrégat. On se propose ici de déterminer la probabilité de rupture pour le cas où celle-ci ne serait pas le résultat de la rupture d'un seul maillon faible mais la conséquence de la rupture de plusieurs sous-domaines. Il a effectivement été observé des cas où un grain primaire a résisté après la rupture de quelques paquets bainitiques.

Nous nous basons sur trois hypothèses pour construire le modèle :

1. la probabilité de rupture d'un paquet est calculée grâce à la formule
$$p_{paquet_i} = \int_0^\infty p(\sigma_{paquet_{loc}} > \sigma_G)\rho_{paquet}(\sigma_G)d\sigma_G \tag{11.7}$$
2. chaque grain est indépendant. La rupture de chaque grain ne dépend que de l'état des paquets dans ce grain
$$p_{grain_j} = f(p_{paquet_1}, p_{paquet_2}, ...) \tag{11.8}$$
3. la rupture d'un seul grain primaire est suffisante pour provoquer la rupture de l'agrégat
$$p_{agrégat} = 1 - \prod_{i=1}^{80}(1 - p_{grain_j}) \tag{11.9}$$

Donc, il nous reste à déterminer les fonctions $f(p_{paquet_1}, p_{paquet_2}, ...)$, une pour chaque grain primaire. On considère un grain primaire j quelconque. On définit tout d'abord la probabilité P_I qui correspond à la probabilité que I paquets bainitiques dans ce grain soient rompus, ni plus ni moins. Ainsi P_0 est la probabilité qu'aucun paquet ne soit rompu, P_1 est la probabilité qu'un paquet et un seul soit rompu (les $(N_{paquet} - 1)$ autres paquets restent entiers, P_2 est la probabilité que 2 paquets soient rompus et que les $(N_{paquet} - 2)$ autres soient non rompus... On obtient alors les expressions du tableau 11.2.

N_{paquet} dans grain j	I : nb paquets rompus	Probabilité P_I
N_{paquet}	0	$P_0 = \prod_{i=1}^{N_{paquet}}(1 - p_{paquet_i})$
$N_{paquet} - 1$	1	$P_1 = \sum_{i=1}^{N_{paquet}}\{p_{paquet_i}\prod_{j\neq i}(1 - p_{paquet_j})\}$
$N_{paquet} - 2$	2	$P_2 = \sum\{\prod_{j\neq i} p_{paquet_i}p_{paquet_j}\prod_{k\neq i,k\neq j}(1 - p_{paquet_k})\}$
$N_{paquet} - 3$	3	$P_3 = \sum\{\prod_{j\neq i\neq k} p_{paquet_i}p_{paquet_j}p_{paquet_k}\prod_{l\neq i,l\neq j,l\neq k}(1 - p_{paquet_l})\}$
...	...	...
...	...	...

TAB. *11.2. P_I : Probabilité que I paquets bainitiques, ni plus ni moins, soient rompus dans un grain primaire donné*

On note :

- $P_{1pa/gr}$ la probabilité que la rupture d'un paquet seul provoque la rupture du grain ;
- $P_{2pa/gr}$ la probabilité que la rupture de deux paquets provoque la rupture du grain ;
- $P_{3pa/gr}$ la probabilité que la rupture de trois paquets provoque la rupture du grain.
- ...

Dans ce cas, $P_1.P_{1pa/gr}$ est la probabilité de rupture du grain causée par la rupture d'un seul paquet ; $P_2.P_{2pa/gr}$ est la probabilité de rupture du grain causée par la rupture simultanée de deux paquets... Chaque scénario possible conduisant à la rupture du grain exclut l'autre. La probabilité de rupture du grain peut donc s'exprimer par la somme des probabilités d'occurence de chaque scénario :

$$p_{grain} = \sum_{I=1}^{N_{paquet}} P_I.P_{Ipa/gr} \tag{11.10}$$

Pour appliquer cette approche, nous acceptons l'hypothèse qu'il existe un nombre $N_{ru/gr}$ de ruptures de paquets par grain à partir duquel le grain est assurément rompu. Pour une première application, ce nombre est fixé à 4 et alors $P_{Ipa/gr} = 1$ pour $I \geqslant 4$. L'équation devient :

$$p_{grain} = \sum_{I=1}^{N_{paquet}} P_I.P_{ipa/gr} = P_1.P_{1pa/gr} + P_2.P_{2pa/gr} + P_3.P_{3pa/gr} + P_4 + P_5 + ... + P_{N_{paquet}} \tag{11.11}$$

Si on modifie la valeur de $N_{ru/gr}$, il faut s'assurer que le processus de génération de la microstructure garantit ce nombre minimal de paquets par grain pour tous les grains.

On considère que, parmi tous les paquets du grain, soit aucun n'est rompu, soit un seul est rompu, soit deux sont rompus, ..., soit tous sont rompus. Ceci se traduit par : $P_0 + P_1 + .. + P_{Npaquet} = 1$, si bien que :

$$p_{grain} = P_1.P_{1pa/gr} + P_2.P_{2pa/gr} + P_3.P_{3pa/gr} + 1 - P_0 - P_1 - P_2 - P_3 \tag{11.12}$$

et :

$$p_{grain} = 1 - P_0 - P_1(1 - P_{1pa/gr}) - P_2(1 - P_{2pa/gr}) - P_3(1 - P_{3pa/gr}) \tag{11.13}$$

Pour évaluer la probabilité de rupture du grain, il faut à ce niveau de la démarche faire des hypothèses (qui doivent être confirmées par des observations de la microstructure) concernant les probabilités de rupture conditionnelles $P_{Ipa/gr}$. Deux suggestions sont retenues ici :

- des solutions "segmentées" basées sur des valeurs remarquables de probabilité (0, 0,5 et 1). On examinera successivement les cas :
  - $P_{1pa/gr} = 0.0$, $P_{2pa/gr} = 0.0$, $P_{3pa/gr} = 0.0$
  - $P_{1pa/gr} = 0.0$, $P_{2pa/gr} = 0.0$, $P_{3pa/gr} = 1.0$
  - $P_{1pa/gr} = 0.0$, $P_{2pa/gr} = 1.0$, $P_{3pa/gr} = 1.0$
  - $P_{1pa/gr} = 0.5$, $P_{2pa/gr} = 1.0$, $P_{3pa/gr} = 1.0$
  - $P_{1pa/gr} = 1.0$, $P_{2pa/gr} = 1.0$, $P_{3pa/gr} = 1.0$
- une solution "lissée", basée sur une représentation de ces probabilités sous une forme couramment rencontrée dans la nature, celle d'une sigmoïde :

  $$P_{Ipa/gr} = 1 - \exp(-aI^b) \tag{11.14}$$

  où a et b sont des paramètres ajustables. On les calcule en prenant en référence la probabilité $P_{ref} = P_{1pa/gr}$, et en prenant en compte le fait qu'un grain est quasi-sûrement

rompu si 4 de ses paquets sont rompus : $P_{4pa/gr} = 0,99$. Cette solution permet ensuite de tracer l'évolution de la probabilité de rupture de l'agrégat en fonction d'un seul paramètre arbitrairement choisi P_{ref}.

Les résultats de ces différentes analyses sont reportées les tableaux 11.3 et figure 11.6.

			Déformation équivalente (%)		
$P_{1pa/gr}$	$P_{2pa/gr}$	$P_{3pa/gr}$	2.5	5.0	7.5
0.0	0.0	0.0	0.0443530	0.3062224	0.7134880
0.0	0.0	1.0	0.0443550	0.3111714	0.7150133
0.0	1.0	1.0	0.0443608	0.3259648	0.7195623
0.5	1.0	1.0	0.7040679	0.9800149	0.9995083
1.0	1.0	1.0	0.9183937	0.9995866	0.9999996

TAB. *11.3. Probabilités de rupture de l'agrégat obtenues avec les solutions "segmentées" (matériau non irradié, -90°C, $\gamma_R = 14Jm^{-2}$)*

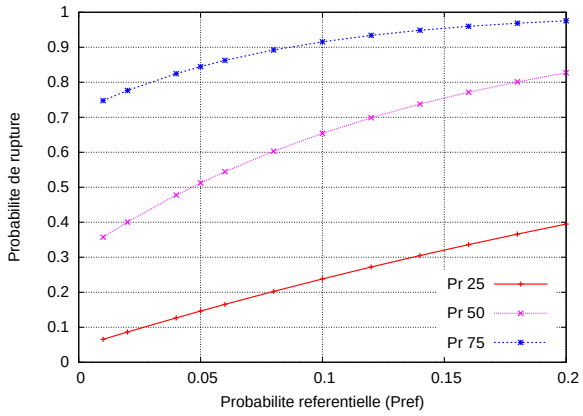


FIG. *11.6. Probabilités de rupture de l'agrégat obtenues avec la solution "lissée", en fonction de la probabilité référentielle $P_{ref} = P_{Ipa/gr}$ (matériau non irradié, -90°C, $\gamma_R = 14Jm^{-2}$)*

D'après les résultats des solutions segmentées, obtenus avec des valeurs remarquables de $P_{Ipa/gr}$, c'est la probabilité qu'un seul paquet conduise à la rupture du grain qui joue le rôle le plus important : si $P_{1pa/gr} = 0$, la probabilité de rupture de l'agrégat varie très peu quelles que soient les valeurs de $P_{2pa/gr}$ et de $P_{3pa/gr}$ prises parmi 0 et 1 et quel que soit le niveau de déformation considéré. Ceci apporte du sens à la deuxième suggestion ("lissée"), où la probabilité de rupture de l'agrégat n'est définie qu'en fonction de $P_{ref} = P_{1pa/gr}$. On constate par ailleurs en faisant tendre P_{ref} vers 0 pour chaque courbe, que la solution lissée fournit sensiblement les mêmes résultats que les solutions segmentées. Il semble donc au travers de cette analyse préliminaire de l'effet de la forme d'évolution de $P_{Ipa/gr}$ en fonction de I que les seuls paramètres prépondérants soient $P_{1pa/gr}$ et $N_{ru/gr}$ le nombre de ruptures de paquets à partir duquel le grain est assurément rompu. Ceci devra être confirmé en poursuivant l'analyse et si tel est le cas, on pourra, pour d'autres applications de cette approche "multi-barrières" adopter une paramétrisation de la probabilité de rupture de l'agrégat du type de la solution lissée.

11.4 Conclusion

Dans ce chapitre, le calcul de probabilité de rupture de l'agrégat a été mis en œuvre suivant le concept du maillon faible pour toutes les températures et pour les deux états, irradié ou non. L'énergie de surface est apparue comme un paramètre majeur : elle conditionne à la fois les valeurs de probabilités de rupture mais aussi l'allure de la variation de la probabilité de rupture en fonction de la contrainte principale maximale. Relativement à l'énergie de surface ou à l'état de contrainte principale maximale, l'influence de l'état d'irradiation sur la probabilité de rupture est faible.

En choisissant respectivement le grain primaire ou le paquet bainitique comme maillon faible, on a montré l'importance de ce choix sur les probabilités de rupture : à la déformation de $7,5\%$ elles sont de l'ordre de $0,005$ si le maillon faible est un grain, de l'ordre de 1 si le maillon faible est un paquet. Ceci a motivé le développement de l'approche "multi-barrières" où la rupture complète de l'agrégat ne se produit que sous l'effet de multiples micro-ruptures de paquets au sein d'un même grain. Cette approche peut-être appliquée en fonction de deux paramètres physiques, l'un correspond à la probabilité que la rupture d'un seul paquet entraîne la rupture du grain auquel il appartient, l'autre étant le nombre de ruptures de paquets à partir duquel le grain est considéré comme totalement rompu.

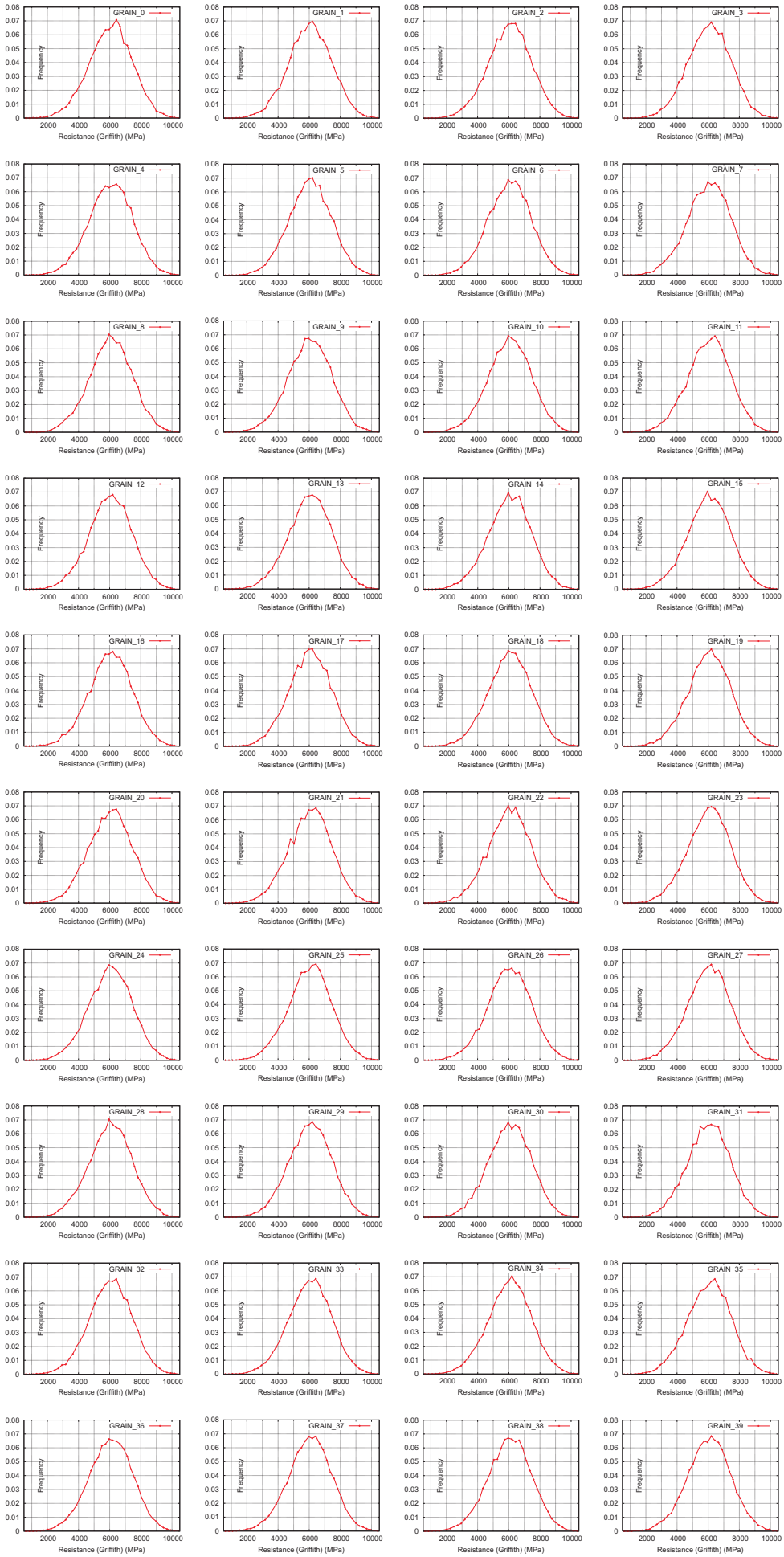


FIG. *11.7. Résistance des grains (Contrainte Griffith), MPa. Les distributions sont calculées avec :* $\gamma_R = 10J/m^{-2}$ *et* $a_{Max} = 2\mu m^2$.

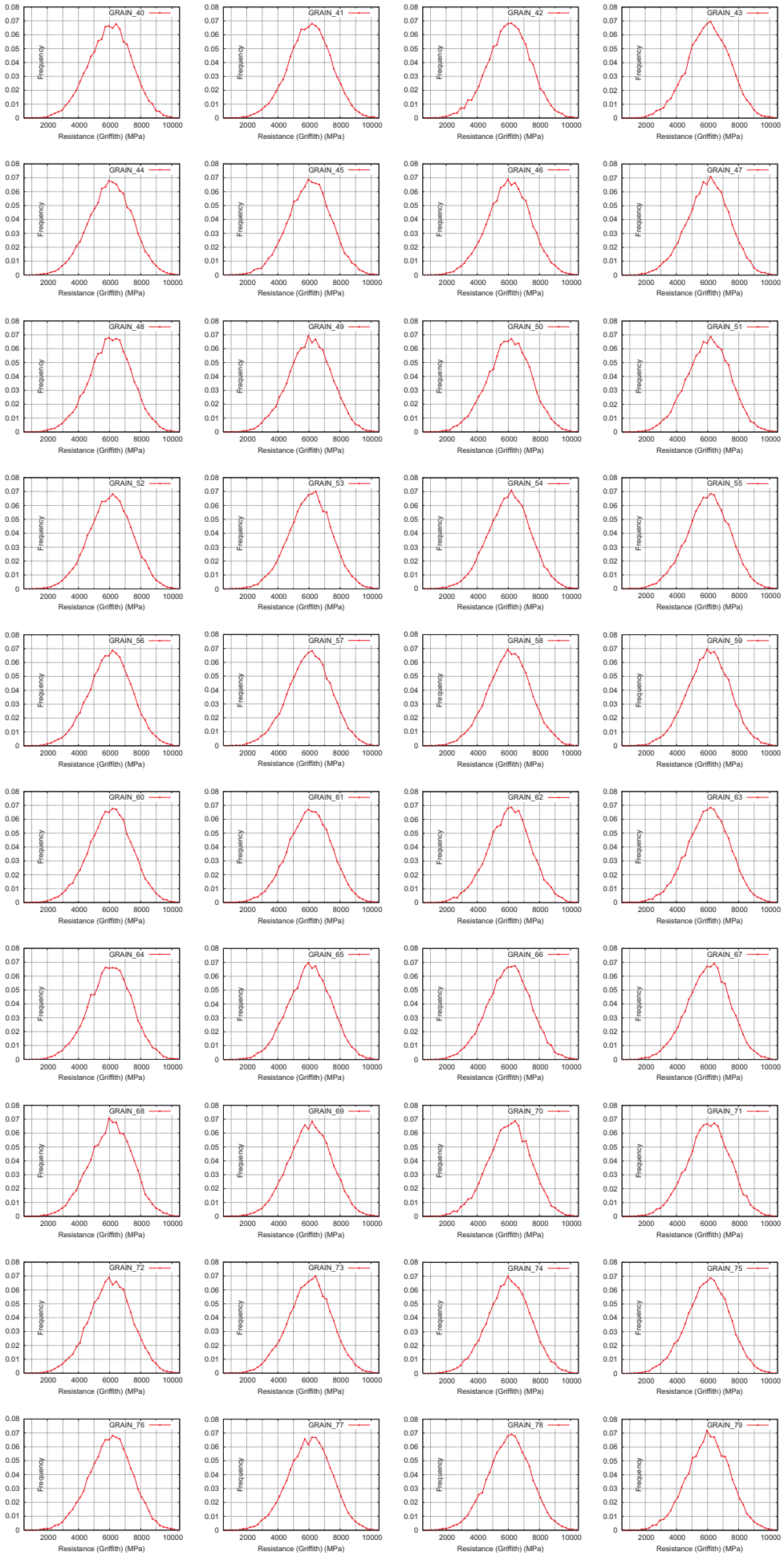


FIG. *11.8. Résistance des grains (Contrainte Griffith), MPa. Les distributions sont calculées avec :* $\gamma_R = 10J/m^{-2}$ *et* $a_{Max} = 2\mu m^2$.

Conclusions et Perspectives

Conclusions

Le présent travail prolonge une action déjà entreprise dans plusieurs laboratoires pour introduire plus de physique dans l'approche locale de la rupture fragile. La contribution qui est faite traite uniquement les aspects numériques, qui restent encore critiques malgré les énormes progrès réalisés par les ordinateurs. Les buts visés consistaient à introduire des modèles prenant en compte de façon explicite les mécanismes physiques, et à les utiliser dans des calculs portant sur des microstructures réalistes. Par rapport aux travaux antérieurs, il s'agissait également de prendre en compte l'effet de l'irradiation. L'ensemble de ces objectifs sont en bonne voie d'être atteints.

Des modèles cristallographiques basés sur les densités de dislocations sont maintenant opérationnels dans le code ZéBuLoN, en petites et grandes transformations, avec des algorithmes explicites et implicites. Nous avons utilisé un modèle dit de Kocks-Rauch, mais nous avons également implanté un modèle voisin, le modèle de Tabourot. Les tests réalisés montrent que le fonctionnement est correct pour toutes ces configurations.

Les paramètres du modèle cristallographique ont été identifiés sur l'acier 16MND5 à plusieurs températures, à l'état irradié et à l'état non irradié. Nous avons prêté une attention particulière à la cohérence des paramètres pour les différentes températures. Une étude de sensibilité a été réalisée. Les résultats de celle-ci en même temps que des considérations physiques nous ont amenés à représenter l'effet de l'irradiation comme une modification d'un nombre réduit de paramètres (τ_0, la cission critique ; G_0, l'énergie nécessaire pour que la dislocation progresse à 0 K). Les courbes sont très bien simulées jusqu'à plus de 10% de déformation.

Ayant en main un modèle mis à jour, nous avons pu effectuer des simulations d'agrégats 3D. Suivant en cela les recommandations des études précédentes, nous avons choisi de faire figurer un nombre important de variants dans chaque grain (de l'ordre d'une cinquantaine). C'est en effet la caractéristique primordiale de la microstructure que d'avoir un grand nombre de domaines voisins ayant des orientations prédéfinies. L'effet lié à la cristallographie étant plus important que l'effet lié à la morphologie, nous n'avons pas cherché à poursuivre dans la voie de construction de géométries bainitiques typiques. Par contre, une grande attention a été donnée aux chargements, qui sont à triaxialité contrôlée. Une méthode a été mise au point dans le cadre de la thèse pour assurer n'importe quelle triaxialité dans le domaine plastique.

Les calculs ont été effecctués sur des matériaux non irradiés à température ambiante, à -60°C , -90°C et -196°C , ainsi que sur matériau irradié, à l'ambiante, à -90°C et à -120°C . Faute de temps, l'analyse détaillée des résultats n'a pu être menée qu'à -90°C sur le matériau non irradié. On note classiquement une distribution de contrainte qui respecte les domaines cristallographiques, si bien qu'on peut trouver de relativement larges zones peu chargées, ou au contraire en surcharge ; les dislocations, comme les déformations plastiques, se distribuent selon des lignes de glissement qui traversent les différents domaines. L'hétérogénéité de déformation augmente avec la déformation moyenne.

La méthodologie de l'approche locale micromécanique a été définie au cours de ce travail. Dans la mesure où l'on dispose d'une information *à l'intérieur* de l'élément de volume traditionnel du mécanicien (représenté ici par l'agrégat polycristallin), il y a une occasion de dépasser le modèle traditionnel du maillon le plus faible et d'introduire des informations plus précises, telles que le nombre de paquets qui peuvent être rompus sans que le grain ne soit mis en danger. Les hypothèses qui ont été choisies ici doivent être considérées comme une illustration des possibilités

nouvelles attachées à cette approche, sans constituer pour le moment un cadre définitif. On peut en effet discuter de la pertinence qu'il y a à considérer le grain comme élément déterminant de la rupture (donc à le prendre comme volume critique pour l'application de la théorie du maillon le plus faible). Il faut également discuter des méthodes les plus pertinentes pour prendre en compte les différentes barrières (joints de paquets, joints de grains) qui sont susceptibles de bloquer les micro-fissures. Pour que l'approche devienne opérationnelle et totalement exploitable, il reste donc à considérer un certain nombre de développements, qui sont indiqués dans la section suivante.

Perspectives

L'un des défauts des simulations actuelles est leur difficulté, et le temps CPU important qu'elles nécessitent. Il faudra donc revisiter les modèles de comportement pour rendre l'intégration plus robuste, notamment au niveau du choix des systèmes actifs. Sans doute faut-il envisager également d'adapter, sinon la forme du modèle, mais du moins celle du schéma d'intégration (en effectuant d'autres changements de variables ?) pour pouvoir assurer de plus grands pas de calcul.

On dispose maintenant d'une énorme base de résultats de calculs qui doit être analysée en détail. Afin de comprendre mieux les différences de mécanismes de déformation et d'endommagement entre les différentes températures, on doit considérer l'évolution des distributions spatiales et temporelles de glissement et de densité de dislocations, ainsi que la redistribution des contraintes au voisinage des points critiques. Il faut également considérer les cas pathologiques qui conduisent à des situations dangereuses vis-à-vis du risque de rupture, en élucidant entre autre la criticité des différentes frontières de domaine (qu'est-ce qui est le plus critique, les joints de grains quelconques, ou bien certains joints entre paquets bainitiques ?), et les modifications apportées par l'irradiation.

Cependant, la direction de recherche la plus importante à notre stade est un retour sur l'expérience. Nous avons en effet maintenant en notre possession une quantité considérable de données de l'échelle microstructurale. Ces données doivent être confrontées avec l'expérience : il faut à cet effet obtenir des résultats quantitatifs concernant la plasticité locale, tels que les systèmes activés, la transmission de déformation d'un paquet à l'autre, la localisation de la déformation, d'une part ; il faut par ailleurs collecter des informations sur la rupture, comme le nombre de paquets rompus qui n'ont pas donné lieu à des ruptures plus importantes, l'orientation des paquets rompus, leur voisinage,... Il faut enfin avoir des informations sur l'évolution de toutes ces caractéristiques lors de l'irradiation.

C'est à ce prix qu'on pourra justifier l'un des choix possibles dans la construction des méthodes multi-barrières, et également le modèle choisi pour l'effet d'irradiation. On devrait enfin considérer la possibilité de traiter le comportement avec des modèles plus complexes, comme des modèles d'ordre plus élevé (second gradient,...) afin de rendre compte du durcissement probable observé en raison de la petite taille de certaines zones.

Quatrième partie

Annexe

Annexe A

Divergence du méthode Newton et explications

A.1 Problème rencontré

Après avoir présenté la méthode en petites déformations, avec intégration explicite et implicite dans ZéBuLon, nous avons testé sa robustesse en utilisant un point de Gauss. Les paramètres matériaux sont dans la table A.1 et les conditions de chargement dans la table A.2.

$C11(GPa)$	$C12(GPa)$	$C44(GPa)$	$\dot{\gamma}_0$	$\tau_0(MPa)$	$T(°K)$	$b(m)$	a_{su}
275.2	112.4	81.4	$1.E+6\,s^{-1}$	132	298	$2.514E-10$	0.25
K	$g_c(m)$	$r_i(m)$	$d(m)$	$\Delta G_0(eV)$	$\tau_R(MPa)$	p	q
22.9	$8.E-8$	$6.32E-8$	$10.E-6$	0.77	498.	0.335	1.12

TAB. *A.1. Paramètres des matériaux*

Temps (s)	$\sigma11(MPa)$	$\sigma22(MPa)$	$eto33$	$\sigma12(MPa)$	$\sigma23(MPa)$	$\sigma31(MPa)$
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
20.0	0.0	0.0	0.2	0.0	0.0	0.0

TAB. *A.2. Conditions de la chargement appliquée sur un point de Gauss*

On observe que le bassin d'attraction de la méthode de Newton est relativement limité, en raison de la forte non-linéarité du problème, et que sa taille dépend du nombre de systèmes individuels. La méthode ne converge pas si on cherche à effectuer moins de 34 pour 12 systèmes et 314 pour 24 systèmes.

A.2 Explications

Afin d'illustrer le comportement de la méthode d'intégration, nous reprenons le système (6.17), et nous introduisons certaines simplifications.

A.2.1 Première explication

On considère le premier incrément plastique d'un calcul pour lequel on n'active que un seul système de glissement. Dans ce cas, tous les composantes de l'incrément de déformation plastique sont proportionnelles, si bien que l'étude du système peut se limiter à :

$$\begin{cases} \Delta\varepsilon^e_{11} = \Delta\varepsilon^t_{11} - \Delta\gamma^s m^s_{11} \\ \left[\begin{array}{ll} \Delta\gamma^s = \dot{\gamma}_0 \exp\left(-\frac{\Delta G_0}{kT}\left(1-\left(\frac{\tau^s_{eff(\varepsilon^e_t+\theta\Delta\varepsilon^e)}}{\tau_R}\right)^p\right)^q\right).\Delta t & if\ \frac{\tau^s_{eff(\varepsilon^e_t+\Delta\varepsilon^e_t)}}{\tau_R} < 1 \\ \Delta\gamma^s_{t+\Delta t} = \dot{\gamma}_0.\Delta t & if\ \frac{\tau^s_{eff(\varepsilon^e_t+\theta\Delta\varepsilon^e)}}{\tau_R} >= 1 \end{array} \right. \end{cases}$$

L'obtention de $\Delta\varepsilon^e_{11}$ et de $\Delta\gamma^s$ permet de calculer les autres composantes de $\Delta\underset{\sim}{\varepsilon}$, de même que Δr^s. En pasant $\Delta\varepsilon^e = \Delta\varepsilon^e_{11}$ nous liaisons les deux fonctions ci-dessous, en figure A.1 :

$$\begin{cases} f1\left(\Delta\varepsilon^e\right) & = \Delta\gamma^s m^s_{11} = \Delta\varepsilon^t_{11} - \Delta\varepsilon^e_{11} \\ f2\left(\Delta\varepsilon^e\right) & = \Delta\gamma^s m^s_{11} = \left[\begin{array}{ll} \dot{\gamma}_0 \exp\left(-\frac{\Delta G_0}{kT}\left(1-\left(\frac{\tau^s_{eff(\Delta\varepsilon^e_t)}}{\tau_R}\right)^p\right)^q\right).\Delta t & if\ \frac{\tau^s_{eff}}{\tau_R} < 1 \\ \dot{\gamma}_0.\Delta t & if\ \frac{\tau^s_{eff}}{\tau_R} >= 1 \end{array} \right. \end{cases}$$

L'intersection des courbes, fournit les racines du système. Ici, les valeurs initiales de l'algorithme Newton sont : $\Delta\varepsilon^e = \Delta\varepsilon^t$ et $\Delta\gamma = 0$. Quand l'incrément est petit, le point fixe fonctione bien, et l'agrorithme de Newton converge vers la valeur attendue. Quand l'incrément est grand, l'agrorithme de Newton converge vers le valeur non-attendue

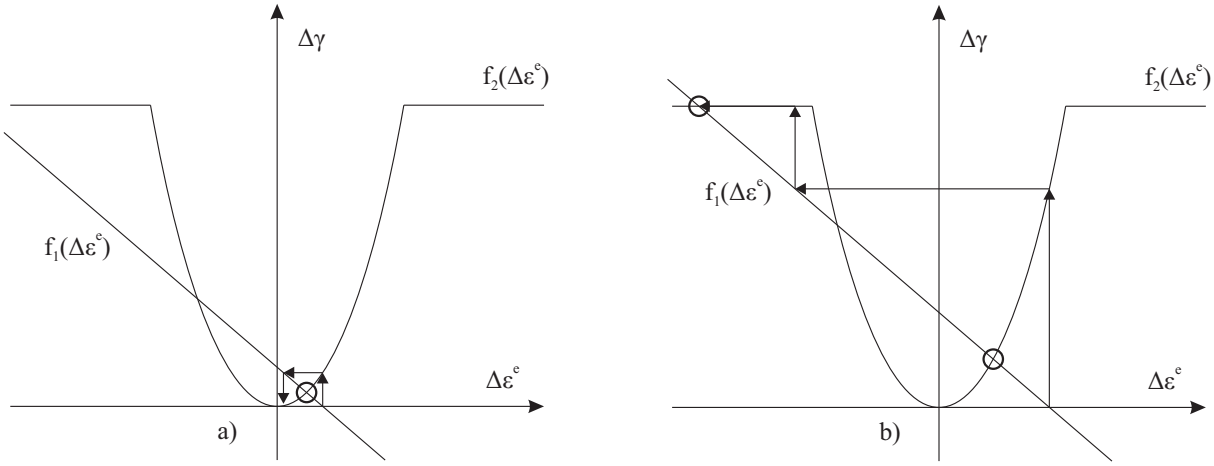


FIG. *A.1. Schema de convergence : converge ver le valeur attendue quand incrément petit et non attendue quand incrément grand*

A.2.2 Deuxième explication

Une autre raison d'instabilité provient de la troisième équation du système (6.17) :

$$\Delta r_t^s = |\Delta\gamma^s| \left(\frac{b}{D_{grain}} + \frac{\sqrt{\sum_{u\neq s} \left(r_t^u + \Delta r_t^u\right)}}{K(T)} - g_c(T)\left(r_t^s + \Delta r_t^s\right) \right)$$

A proximité d'une orientation de haute symétrie telle que (001), il y a 4 systèmes actifs, le glissement colinéaire étant interdit par les valeurs du coefficient d'interaction dans la matrice d'écrouissage. Pour des grands incréments de chargement, la valeur de l'incrément Δr^s peur se révéler bien plus grande que la valeur initiale r^s, si bien qu'on peut avoir une configuraton telle que :

$$\Delta r_t^s = \Delta\gamma_t^s \left(\frac{b}{d} + \frac{\sqrt{3.\left(\Delta r_t^s\right)}}{K} - \frac{g_c\left(\Delta r_t^s\right)}{b} \right)_{t+\theta t}^{s}$$

La racine de l'équation ci-dessus est ainsi la racine du système d'équations :

$$\begin{cases} f(\Delta r_t^s) = \Delta\gamma_t^s \left(\frac{b}{d} + \frac{\sqrt{3.(\Delta r_t^s)}}{K} - \frac{g_c(\Delta r_t^s)}{b} \right)_{t+\theta t}^{s} \\ f(\Delta r_t^s) = \Delta r_t^s \end{cases}$$

L'intersection des courbes est la racine du système :

$$\begin{aligned} f_1(\Delta r_t^s) &= \Delta\gamma_t^s \left(\tfrac{b}{d} + \tfrac{\sqrt{3.(\Delta r_t^s)}}{K} - \tfrac{g_c(\Delta r_t^s)}{b} \right)_{t+\theta t}^{s} \\ f_2(\Delta r_t^s) &= \Delta r_t^s \end{aligned}$$

Les courbes ci-dessous sont dessinées avec les différentes valeurs de γ et des paramètres du matériau. La procédure de l'algorithme Newton commence avec $f_2(\Delta r_t^s) = 0.$ et $f_1(\Delta r_t^s) = \Delta\gamma_t^s \dfrac{b}{d}$.

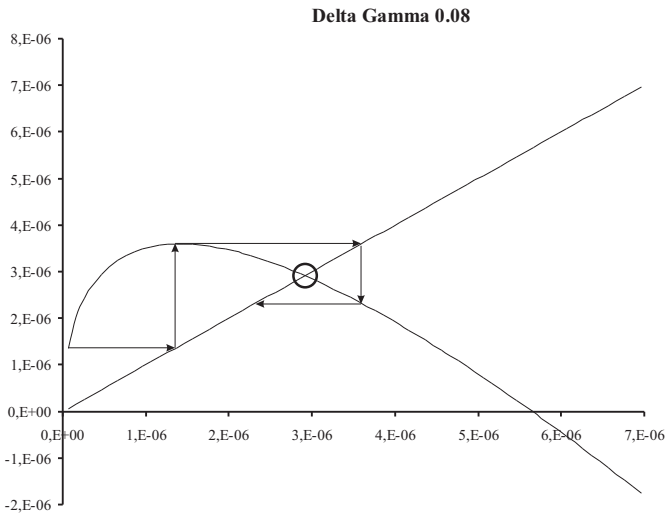


FIG. *A.2. L'algorithme converge quand gamma est petit*

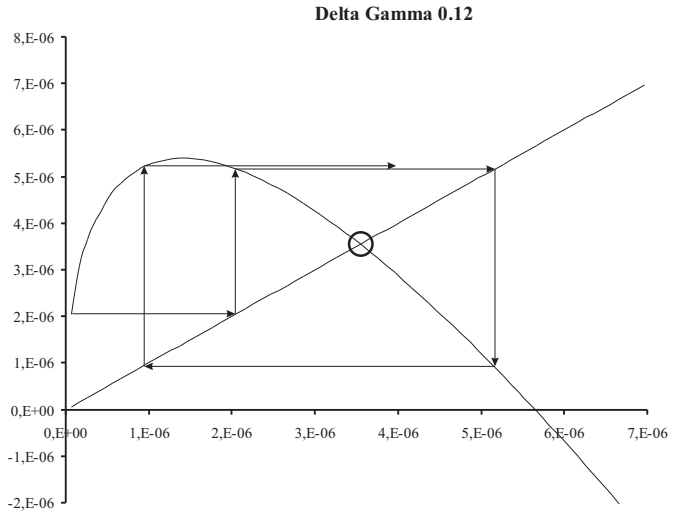


FIG. *A.3. L'algorithme ne converge plus quand gamma est élevé*

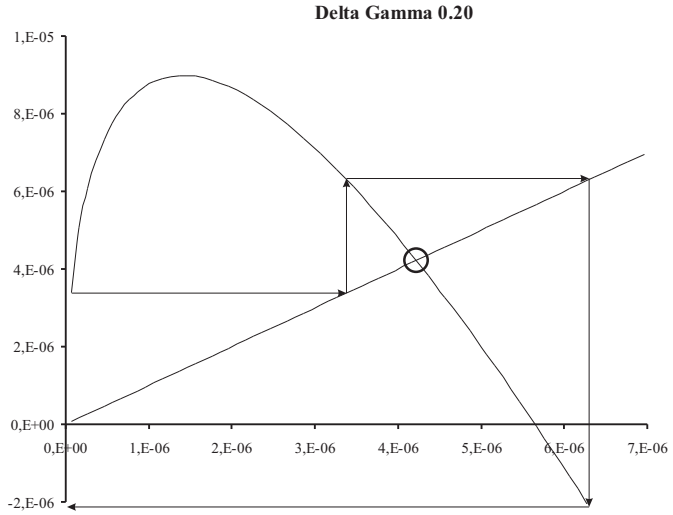


FIG. *A.4. L'algorithme ne converge plus quand gamma est élevé*

A.2.3 Un problème commun

La comparaison avec les implémentations préexistantes des autres modèles de monocristal montre la généralité du problème numérique, exprimé au paragraphe précédent, qui conduit à la définition d'un nombre des pas de temps minimal, nécessaire pour effectuer un calcul donné. Pour un test de traction simple sur un point de Gauss jusqu'à 20% déformation, l'implémentation des modèles, utilisé dans [Abrivard, 2007] nécessite 282 pas au minimum. Les paramètres utilisées pour les deux implémentation sont donnés en Tables : E.24, E.22 et E.23.

Notons que ce type de problème est déjà rencontré par autres numériciens [Musienko, 2005], [Kalidindi and Anand, 1994].

Annexe B

Accélération du temps de calcul

B.1 Identification du problème

Dans calculs numériques, l'évolution de la loi de comportement nécessite une intégration pas à pas. A chaque étape, il faut résoudre le système non linéaire issu de la méthode de Newton qui fournit les incréments des variables à intégrer. Pour bien trouver les bonne racines, cette étape est très importante. Il faut que le système soit bien conditionné. On va examiner les modèles de Kock-Rauch.

B.2 Sensibilité des variables

- Loi d'écoulement

$$\mid \dot{\gamma}^s \mid = \dot{\gamma}_0 exp\left[-\frac{\Delta G(\tau_{eff})}{k_b T}\right] = \dot{\gamma}_0 exp\left[-\frac{\Delta G_0}{k_b T}\left(1-\left(\frac{\tau_{eff}}{\tau_R}\right)^p\right)^q\right]$$

- Loi d'écrouissage

$$\tau_{int} = \frac{(\alpha\mu b)^2\rho}{\tau^s - \tau_0}$$

$$\tau^s = \tau_0 + \tau^s_{eff} + \tau^s_{int}$$

- Loi d'évolution de densités de dislocation

$$\dot{\rho}^s = \frac{\mid \dot{\gamma}^s \mid}{b}\left(\frac{1}{D_{grain}} + \frac{\sqrt{\sum_{s\neq u}\rho^u}}{K(T)} - g_c(T)\rho^s\right)$$

Les variables : $\underset{\sim}{\varepsilon}^e$, γ^s, $r^s = \rho^s.b^2$

$$\begin{cases} \Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^e = \Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^t - \sum\limits_s \Delta\gamma^s.\underset{\sim}{\mathbf{N}}^s \\ \Delta\gamma^s = \dot{\gamma}_0 \exp\left(-\dfrac{\Delta G_0}{kT}\left(1-\left(\dfrac{\tau^s_{eff}(t+\Delta t)}{\tau_R}\right)^p\right)^q\right).\Delta t \\ \Delta r^s = |\Delta\gamma^s|\left(\dfrac{b}{d} + \dfrac{\sqrt{\sum\limits_{u\neq s} a_{su}(r^u_t + \Delta r^u)}}{K} - \dfrac{g_c\,(r^s_t + \Delta r^e)}{b}\right) \end{cases}$$

On s'intéresse à l'équation de $\Delta\gamma^s$:

$$\Delta\gamma^s = \dot{\gamma}_0 \exp\left(-\frac{\Delta G_0}{kT}\left(1-\left(\frac{\tau^s_{eff}(t+\Delta t)}{\tau_R}\right)^p\right)^q\right).\Delta t$$

$$\tau^s_{eff}(t+\Delta t) = (\underset{\sim}{\varepsilon}^e_t + \Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^e) : \underset{\approx}{\mathbf{\Lambda}} : \underset{\sim}{\mathbf{N}}^s - \tau_0 - \frac{\sqrt{\sum\limits_{u\neq s} a_{su}(r^u_t + \Delta r^u)}}{(\underset{\sim}{\varepsilon}^e_t + \Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^e) : \underset{\approx}{\mathbf{\Lambda}} : \underset{\sim}{\mathbf{N}}^s - \tau_0}$$

Coefficient sensibilité relative de $\Delta\gamma^s$ par rapport $\Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^e$ est :

$$Coef_{sensi} = \frac{1}{\Delta\gamma^s}.\frac{\partial\Delta\gamma^s}{\partial\Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^e} = \frac{1}{\Delta\gamma^s}.coef \times \left(1 - \frac{\sqrt{\sum\limits_{u\neq s} a_{su}(r^u_t + \Delta r^u)}}{(\underset{\sim}{\varepsilon}^e_t + \Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^e) : \underset{\approx}{\mathbf{\Lambda}} : \underset{\sim}{\mathbf{N}}^s - \tau_0}\right).\underset{\approx}{\mathbf{\Lambda}} : \underset{\sim}{\mathbf{N}}^s$$

Avec :

$$\begin{aligned} coef &= \dot{\gamma}_0 \exp\left(-\frac{\Delta G_0}{kT}\left(1-\left(\frac{\tau^s_{eff}}{\tau_R}\right)^p\right)^q\right) \\ &\times \left(-\frac{\Delta G_0}{kT}\right).q.\left(1-\left(\frac{\tau^s_{eff}}{\tau_R}\right)^p\right)^{q-1} \\ &\times (-1).p.\left(\frac{\tau^s_{eff}}{\tau_R}\right)^{p-1}.\frac{1}{\tau_R}.\Delta t \\ &= \Delta\gamma^s.\left(-\frac{\Delta G_0}{kT}\right).q.\left(1-\left(\frac{\tau^s_{eff}}{\tau_R}\right)^p\right)^{q-1}(-1).p.\left(\frac{\tau^s_{eff}}{\tau_R}\right)^{p-1}.\frac{1}{\tau_R} \end{aligned}$$

Donc :

$$Coef_{sensi} = \frac{1}{\Delta\gamma^s}.\frac{\partial\Delta\gamma^s}{\partial\Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^e} = \left(-\frac{\Delta G_0}{kT}\right).q.\left(1-\left(\frac{\tau^s_{eff}}{\tau_R}\right)^p\right)^{q-1}(-1).p.\left(\frac{\tau^s_{eff}}{\tau_R}\right)^{p-1}.\frac{1}{\tau_R}$$

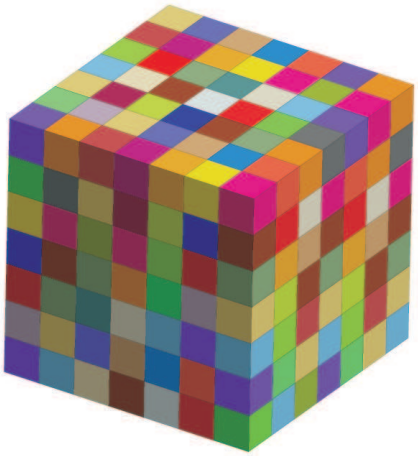
On voit que la sensibilité dépend des paramètres choisies : $p, q, \tau_R, T, \Delta G_0$ et de la valeur de τ_{eff}. Plus τ_{eff} est petite plus sensibilité, donc le temps de calcul est plus long. On utilise les données de référence dans le Tableau B.5 et on calcule la réponse du modèle sur un point de Gauss en traction simple jusqu'à 20% de déformation. La contrainte maximale est introduite pour calculer la sensibilité, les résultats sont données en Table B.1.

Utiliser paramètres initiaux (Tableau B.5), on obtient $Coef_{sensi} = 0.483$; $\tau_{eff} = 7.027(MPa)$

Paramètres référentiels (Tableau B.5)	Paramètres nouveaux	$\tau_{eff_{Max}}$	$Coef_{sensi}$	Rapport entre les $Coef_{sensi}$
$\tau_R = 498(MPa)$	$\tau_R = 2490(MPa)$	$35.130(MPa)$	0.097	$\frac{1}{4.977}$
$T = 25°C$	$T = 100°C$	$0.252(MPa)$	4.515	$\frac{9.353}{1}$
$T = 25°C$	$T = 50°C$	$3.148(MPa)$	0.831	$\frac{1.721}{1}$
$T = 25°C$	$T = -50°C$	$35.621(MPa)$	0.159	$\frac{1}{3.306}$
$T = 25°C$	$T = -100°C$	$75.810(MPa)$	0.094	$\frac{1}{5.515}$
$T = 25°C$	$T = -150°C$	$140.881(MPa)$	0.060	$\frac{1}{8.074}$
$\Delta G_0 = 0.77eV$	$\Delta G_0 = 1.54eV$	$103.435(MPa)$	0.075	$\frac{1}{6.440}$
$\dot{\gamma}_0 = 10^6$	$\dot{\gamma}_0 = 10^4$	$29.319(MPa)$	0.182	$\frac{1}{2.652}$
$t = 400(s)$	$t = 0.4(s)$	$47.954(MPa)$	0.129	$\frac{1}{3.742}$

TAB. *B.1. Les paramètres et les* $Coef_{sensi}$

On a utilisé l'agrégat de 343 grains (Figure B.1). Le temps de calcul est donné dans la Table B.2.



Agrégat :
- *343* (7^3) *élément C3D20*
- *1856 nœuds*
- *5568 Dofs*
- *Chaque cube a une orientation aléatoire*

Condition du chargement :
- *Ori U1 0. ; U2 0. ; U3 0.*
- *Coin U2 0. ; U3 0.*

Temps	*U3 du Plan (z=0)*	*U3 du Plan (z=1)*
0.	*0.*	*0.*
400.	*0.*	*0.2*

FIG. *B.1. Agrégat de 343 cubes et conditions du chargement*

Temps de calcul référentiel : $15142(s)$

Paramètres référentiels	Paramètres nouveaux	Temps de nouveau calcul	Rapport
$\tau_R = 498(MPa)$	$\tau_R = 2490(MPa)$	$8212(s)$	$\frac{1}{1.844}$
$T = 25°C$	$T = -50°C$	$11012(s)$	$\frac{1}{1.375}$
$\Delta G_0 = 0.77eV$	$\Delta G_0 = 1.54eV$	$5361(s)$	$\frac{1}{2.284}$
$\dot{\gamma}_0 = 10^6$	$\dot{\gamma}_0 = 10^4$	$5098(s)$	$\frac{1}{2.970}$
$t = 400(s)$	$t = 0.4(s)$	$4562(s)$	$\frac{1}{3.319}$

TAB. *B.2. Les paramètres et le temps de calcul*

B.3 Solutions

Il faut noter ici que :

$$\Delta\gamma^s = \dot{\gamma}_0 \exp\left(-\frac{\Delta G_0}{kT}\left(1 - \left(\frac{\tau^s_{eff}}{\tau_R}\right)^p\right)^q\right).\Delta t$$

$\Delta\gamma^s$ il est considéré comme une donnée pour chaque pas de calcul, il doit satisfaire des conditions de déformation. Donc, il faut, pour éviter que τ_{eff} devienne trop petite :

- Augmenter la cission τ_R
- Augmenter l'énergie ΔG_0
- Diminuer la température T
- Diminuer le temps d'essay t

Ici, on va diminuer le temps d'essai de 400(s) au 0.4(s). Pourque la simulation donne les résultats similaires, on doit changer les paramètres. Dans ce cas, on ne modifie que τ_0. Tout d'abord on teste sur un point de Gauss pour modifier les paramètres, (Figure B.2). Ensuite, on utilise les paramètres modifiés pour calculer l'agrégat de 343 cubes.

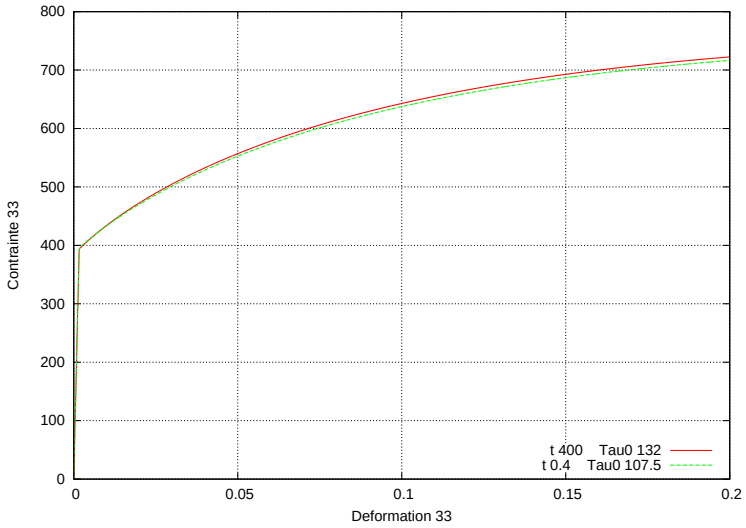


FIG. *B.2. Résultats obtenues sur un point de Gauss avec des jeus de paramètres équivalents*

Paramètres initiaux	Paramètres nouveaux
$t = 400(s)$	$t = 0.4(s)$
$\tau_0 = 132(MPa)$	$\tau_0 = 107.5(MPa)$

TAB. *B.3. La différence entre deux groupes de paramètres*

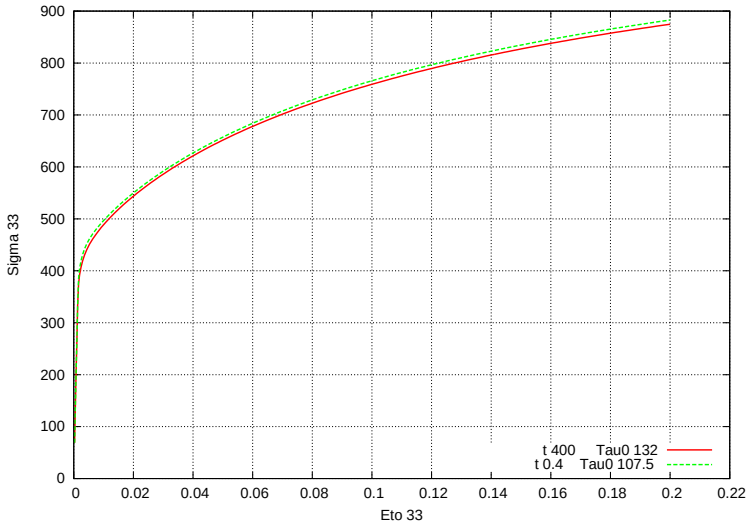


FIG. *B.3. Comparaison la courbe global contrainte 33 et déformation 33*

Temps de calcul initial	Temps de nouveau calcul	Rapport
$15142(s)$	$4562(s)$	$\frac{1}{3.319}$

TAB. *B.4. Comparaison des temps des calculs*

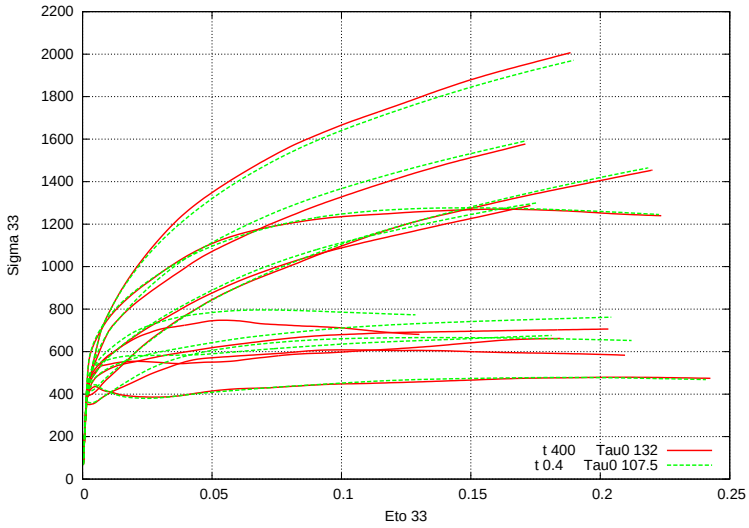


FIG. *B.4. Comparaison de la courbe contrainte $\sigma 33$ et déformation eto33 sur les point de Gauss* Les Point de Gauss comparés sont : (Ele 1, GP 1) ; (Ele 4, GP 21) ; (Ele 8, GP 14) ; (Ele 12, GP 7) ; (Ele 49, GP 9) ; (Ele 86, GP 11) ; (Ele 123, GP 13) ; (Ele 160, GP 15) ; (Ele 197, GP 17).

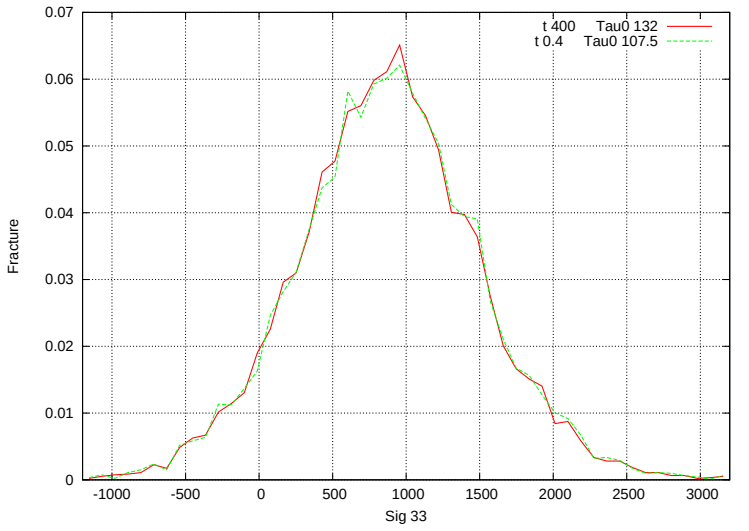


FIG. *B.5. Comparaison de la courbe de distribution de contrainte $\sigma 33$ au 20% déformation global*

$C11(GPa)$	$C12(GPa)$	$C44(GPa)$	$\dot{\gamma}_0$	$\tau_0(MPa)$	$T(°K)$	$b(m)$	a_{su}
275.2	112.4	81.4	$1.E+6\,s^{-1}$	132	298	$2.514E-10$	0.25
K	$g_c(m)$	$r_i(m)$	$d(m)$	$\Delta G_0(eV)$	$\tau_R(MPa)$	p	q
22.9	$8.E-8$	$0.546e-10$	$10.E-6$	0.77	498.	0.335	1.12

TAB. *B.5. Les paramètres de référence.*

Annexe C

Triaxilité en déformation plane

C.1 Matériaux orthogonaux

On va étudier la triaxilité en déformation plane dans le cadre de la déformation finie du matériau orthogonaux. On examine le matériau à n'importe quelle déformation par deux constituants : déformation élastique et déformation plastique.

C.1.1 Déformation élastique

Pour les matériaux orthogonaux, la relation entre déformation élastique et contrainte s'écrit par la loi ci-dessous :

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma}_{11} \\ \boldsymbol{\sigma}_{22} \\ \boldsymbol{\sigma}_{33} \\ \boldsymbol{\sigma}_{12} \\ \boldsymbol{\sigma}_{23} \\ \boldsymbol{\sigma}_{31} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon^e_{11} \\ \varepsilon^e_{22} \\ \varepsilon^e_{33} \\ 2\varepsilon^e_{12} \\ 2\varepsilon^e_{23} \\ 2\varepsilon^e_{31} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \varepsilon^e_{11} \\ \varepsilon^e_{22} \\ \varepsilon^e_{33} \\ 2\varepsilon^e_{12} \\ 2\varepsilon^e_{23} \\ 2\varepsilon^e_{31} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{12} & 0 & 0 & 0 \\ A_{12} & A_{11} & A_{12} & 0 & 0 & 0 \\ A_{12} & A_{12} & A_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & A_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & A_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{12} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{31} \end{pmatrix}$$

Avec :

$$A11 = \frac{C_{11} + C_{12}}{(C_{11} - C_{12})(C_{11} + 2C_{12})} \quad A12 = \frac{-C_{12}}{(C_{11} - C_{12})(C_{11} + 2C_{12})} \quad A44 = \frac{1}{C_{44}}$$

On a :

$$< p >= \frac{\boldsymbol{\sigma}_{11} + \boldsymbol{\sigma}_{22} + \boldsymbol{\sigma}_{33}}{3}$$

$$\Rightarrow < p >= \frac{(C_{11} + 2C_{12})(\varepsilon^e_{11} + \varepsilon^e_{22} + \varepsilon^e_{33})}{3}$$

$$\Rightarrow < p >= \frac{(C_{11} + 2C_{12})(\Delta V)}{3V}$$

C.1.2 Déformation plastique

Si on suppose que le comportement plastique obéit au critère de normalité de l'écoulement à la surface de charge, vitesse de déformation plastique est fonction du tenseur déviateur des contraintes et des déformations plastiques actuelles :

$$\begin{cases} \dot{\varepsilon}^p_{11} = f(\sigma_{11} - \dfrac{\sigma_{22}+\sigma_{33}}{2}, \underset{\sim}{\xi}^p) \\ \dot{\varepsilon}^p_{22} = f(\sigma_{22} - \dfrac{\sigma_{11}+\sigma_{33}}{2}, \underset{\sim}{\xi}^p) \\ \dot{\varepsilon}^p_{33} = f(\sigma_{33} - \dfrac{\sigma_{11}+\sigma_{22}}{2}, \underset{\sim}{\xi}^p) \\ \dot{\varepsilon}^p_{12} = g(\sigma_{12}, \underset{\sim}{\xi}^p) \\ \dot{\varepsilon}^p_{23} = g(\sigma_{23}, \underset{\sim}{\xi}^p) \\ \dot{\varepsilon}^p_{31} = g(\sigma_{31}, \underset{\sim}{\xi}^p) \\ \dot{\varepsilon}^p_{21} = g(\sigma_{12}, \underset{\sim}{\xi}^p) \\ \dot{\varepsilon}^p_{32} = g(\sigma_{23}, \underset{\sim}{\xi}^p) \\ \dot{\varepsilon}^p_{13} = g(\sigma_{31}, \underset{\sim}{\xi}^p) \end{cases}$$

C.2 Conditions limites et interprétations

C.2.1 Conditions limites

On va utiliser la condition limite ($\varepsilon_{11} = f_1(t)$, $\varepsilon_{22} = 0$, $\varepsilon_{33} = f_3(t)$, $\varepsilon_{12} = 0$, $\varepsilon_{23} = 0$, $\varepsilon_{31} = 0$, $\varepsilon_{21} = 0$, $\varepsilon_{32} = 0$, $\varepsilon_{13} = 0$). A cause de ($\varepsilon^e_{12}\varepsilon^p_{12} \geq 0$, $\varepsilon^e_{23}\varepsilon^p_{23} \geq 0$, $\varepsilon^e_{31}\varepsilon^p_{31} \geq 0$, $\varepsilon^e_{12}\varepsilon^p_{21} \geq 0$, $\varepsilon^e_{23}\varepsilon^p_{32} \geq 0$ et $\varepsilon^e_{13}\varepsilon^p_{13} \geq 0$), donc on a :

$$\begin{cases} \varepsilon^e_{12} = 0,\ \varepsilon^e_{23} = 0,\ \varepsilon^e_{31} = 0 \\ \varepsilon^p_{12} = 0,\ \varepsilon^p_{23} = 0,\ \varepsilon^p_{31} = 0 \\ \varepsilon^p_{21} = 0,\ \varepsilon^p_{32} = 0,\ \varepsilon^p_{13} = 0 \\ \boldsymbol{\sigma}_{12} = 0,\ \boldsymbol{\sigma}_{23} = 0,\ \boldsymbol{\sigma}_{31} = 0 \\ \varepsilon^e_{11} = A_{11}\sigma_{11} + A_{12}\sigma_{22} + A_{12}\sigma_{33} \\ \varepsilon^e_{22} = A_{12}\sigma_{11} + A_{11}\sigma_{22} + A_{12}\sigma_{33} \\ \varepsilon^e_{33} = A_{12}\sigma_{11} + A_{12}\sigma_{22} + A_{11}\sigma_{33} \\ \dot{\varepsilon}^p_{11} = f(\sigma_{11} - \dfrac{\sigma_{22}+\sigma_{33}}{2}, \underset{\sim}{\xi}^p) \\ \dot{\varepsilon}^p_{22} = f(\sigma_{22} - \dfrac{\sigma_{11}+\sigma_{33}}{2}, \underset{\sim}{\xi}^p) \\ \dot{\varepsilon}^p_{33} = f(\sigma_{33} - \dfrac{\sigma_{11}+\sigma_{22}}{2}, \underset{\sim}{\xi}^p) \\ < p >= \dfrac{(C_{11}+2C_{12})(\Delta V)}{3V} \\ \varepsilon_{11} = f_1(t), \varepsilon_{33} = f_3(t) \\ \varepsilon^e_{22} + \varepsilon^p_{22} = 0 \end{cases}$$

C.2.2 Interprétation I

$$< p >= \frac{(C_{11}+2C_{12})(\Delta V)}{3V} = \frac{(C_{11}+2C_{12})\{[1+f_1(t)][1+f_3(t)]-1\}}{3}$$

Trace du tenseur des contraintes est linéaire avec la déformation volumique

C.2.3 Interprétation II

$\varepsilon^e_{22} + \varepsilon^p_{22} = 0$

La déformation élastique ε^e_{22} est très faible donc : $\begin{cases} \varepsilon^p_{22} = 0 \\ \dot{\varepsilon}^p_{22} = f(\sigma_{22} - \dfrac{\sigma_{11}+\sigma_{33}}{2}, \underset{\sim}{\xi}^p) = 0, \forall t \end{cases}$

$\Rightarrow |\sigma_{22} - \dfrac{\sigma_{11}+\sigma_{33}}{2}| \leq \sigma_0$ Avec σ_0 est limite élastique au état $\underset{\sim}{\xi}^p$

$\Rightarrow |\dfrac{3\sigma_{22}}{2} - \dfrac{3p}{2}| \leq \sigma_0$

$\Rightarrow |\sigma_{22} - p| \leq \dfrac{2\sigma_0}{3}$

$\Rightarrow \begin{cases} p - \dfrac{2\sigma_0}{3} \leq \sigma_{22} \leq p + \dfrac{2\sigma_0}{3} \\ p \approx \sigma_{22} \end{cases}$

C.2.4 Interprétation III

On va comparer les deux cas de condition limite $f^1_1(t), f^1_3(t)$ et $f^2_1(t), f^2_3(t)$ avec $f^1_3(t) = f^2_3(t)$, $f^1_1(t) \approx f^2_1(t)$. Donc : $\varepsilon^1_{11} = \varepsilon^2_{11}, \varepsilon^1_{22} = \varepsilon^2_{22} = 0, \varepsilon^1_{33} = \varepsilon^2_{33}\ \forall t$. Si on néglige la déformation élastique par rapport déformation plastique :

$$\Rightarrow \begin{cases} \varepsilon^{1p}_{11} = \varepsilon^{2p}_{11},\ \varepsilon^{1p}_{22} = \varepsilon^{2p}_{22} = 0,\ \varepsilon^{1p}_{33} = \varepsilon^{2p}_{33} \\ \dot{\varepsilon}^{1p}_{11} = f(\sigma^1_{11} - \dfrac{\sigma^1_{22}+\sigma^1_{33}}{2}, \underset{\sim}{\xi}^{1p}) = \dot{\varepsilon}^{2p}_{11} = f(\sigma^2_{11} - \dfrac{\sigma^2_{22}+\sigma^2_{33}}{2}, \underset{\sim}{\xi}^{2p}) \\ \dot{\varepsilon}^{1p}_{22} = f(\sigma^1_{22} - \dfrac{\sigma^1_{11}+\sigma^1_{33}}{2}, \underset{\sim}{\xi}^{1p}) = \dot{\varepsilon}^{2p}_{22} = f(\sigma^2_{22} - \dfrac{\sigma^2_{11}+\sigma^2_{33}}{2}, \underset{\sim}{\xi}^{2p}) \\ \dot{\varepsilon}^{1p}_{33} = f(\sigma^1_{33} - \dfrac{\sigma^1_{11}+\sigma^1_{22}}{2}, \underset{\sim}{\xi}^{1p}) = \dot{\varepsilon}^{2p}_{33} = f(\sigma^2_{33} - \dfrac{\sigma^2_{11}+\sigma^2_{22}}{2}, \underset{\sim}{\xi}^{2p}) \\ \forall t \end{cases}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \sigma^1_{11} - \sigma^1_{22} = \sigma^2_{11} - \sigma^2_{22} \\ \sigma^1_{22} - \sigma^1_{33} = \sigma^2_{22} - \sigma^2_{33} \\ \sigma^1_{33} - \sigma^1_{11} = \sigma^2_{33} - \sigma^2_{11} \\ \forall t \end{cases}$$

$$\Rightarrow \quad \sigma^1_{Mises} = \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{(\sigma^1_{11}-\sigma^1_{22})^2 + (\sigma^1_{22}-\sigma^1_{33})^2 + (\sigma^1_{33}-\sigma^1_{11})^2} = \sigma^2_{Mises}$$

Contraintes Von Mises sont prèsque la même

C.2.5 Résultats supportent les interprétations

On utilise agrégat simple ci-après :

Agrégat :
- *343 (7^3) élément C3D20*
- *1856 nœuds*
- *5568 Dofs*
- *Chaque cube a une orientation aléatoire*

Condition du chargement :
- *Ori U1 0. ; U2 0. ; U3 0.*
- *Coin U2 0. ; U3 0.*

- *Plan (y=0) U2 0., Plan (y=1) U2 0.*
- *Plan (z=0) U3 0., Plan (z=1) U3 :* $f_3(t) = \frac{0.14}{280}t.$
- *Plan (x=0) U1 0.*

FIG. *C.1. Agrégat de 343 cubes et conditions du chargement commun*

Cas 1 : Le cas conserve parfaitement la volume

$$1. \times (1 + f_3(t)) \times (1 + f_3(t)) = 1 \Rightarrow f_1(t) = \frac{1}{1 + f_3(t)} - 1$$

Cas 2 : η 0.8

$$f_1(t) = 0.8 \left[\frac{1}{1 + f_3(t)} - 1 \right]$$

Cas 3 : η 0.8′

$$f_1(t) = 0.8 \left[\frac{1}{1 + f_3(t)} - 1 \right] \frac{t}{280}$$

Cas 4 : η 1.2

$$f_1(t) = 1.2 \left[\frac{1}{1 + f_3(t)} - 1 \right]$$

Cas 5 : η 1.2′

$$f_1(t) = 1.2 \left[\frac{1}{1 + f_3(t)} - 1 \right] \frac{t}{280}$$

Cas 6 : *Libre*

$\sigma_{11} = 0.$; $\sigma_{22} = 0.$

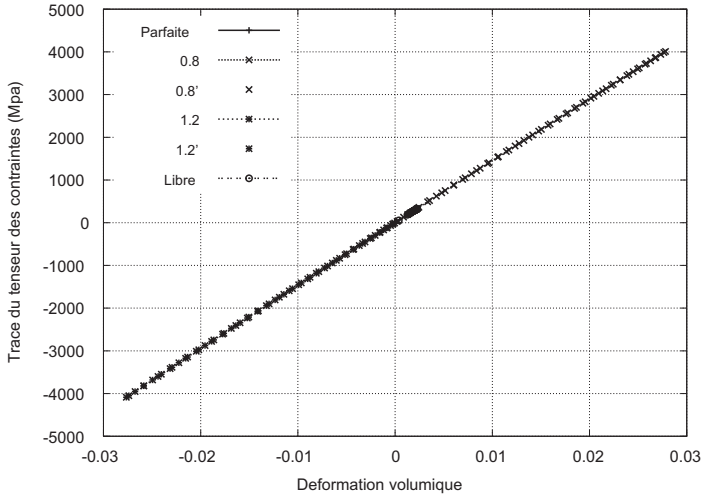


FIG. *C.2. Contrainte hydrostatique ne dépende que la déformation volumique*

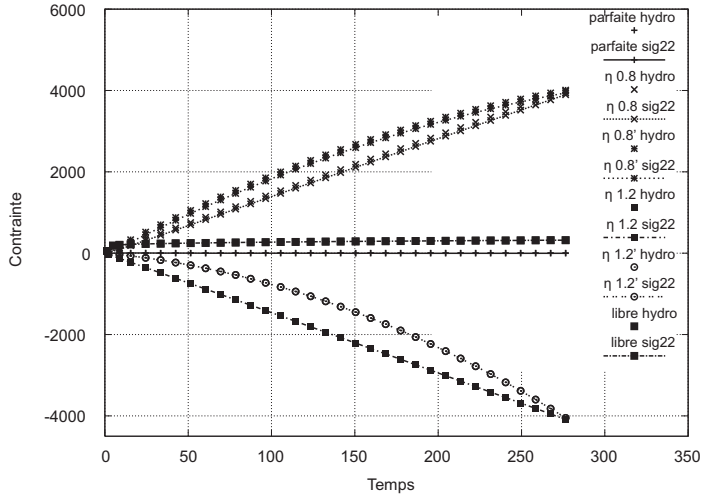


FIG. *C.3. Contraintes hydrostatiques sont approximatives contraintes* $\boldsymbol{\sigma}_{22}$

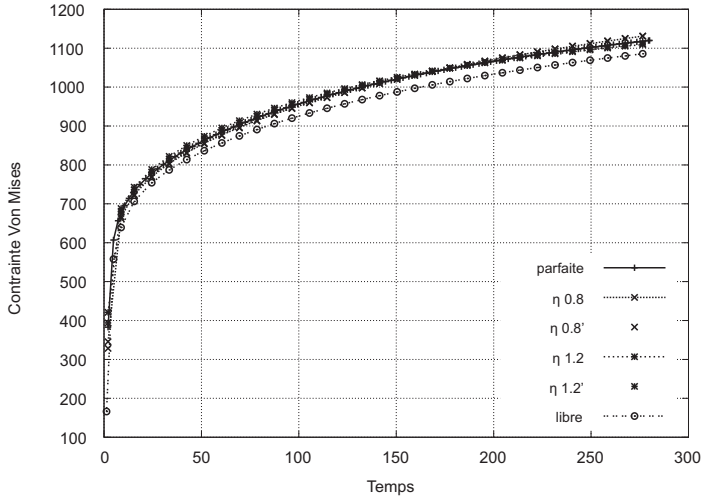


FIG. *C.4. Contrainte Von Mises sont s'approche l'une et l'autre*

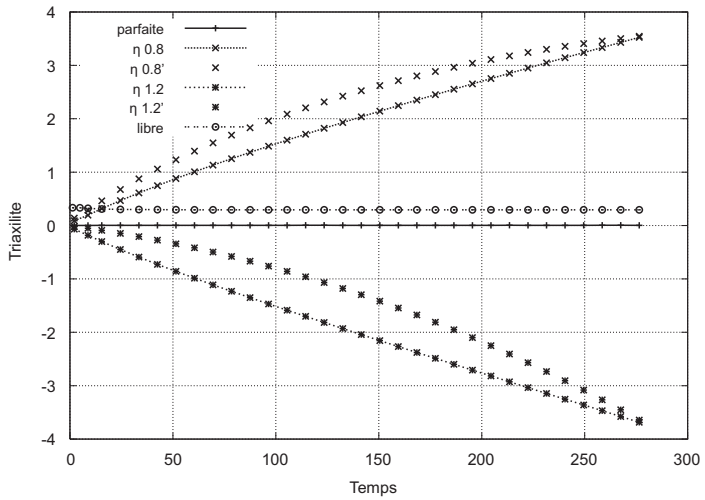


FIG. *C.5. Evolution de la triaxilité au cours du temps*

Annexe D

D.1 Cission résolue

On se place sur la configuration relâchée isocline [J.Mandel, 1972], [Mandel, 1994], en suivant donc la décomposition classique de la figure A.1. La loi de comportement sera écrite sur cette configuration. La relation entre la contrainte Piola-Kirchhoff S définie sur cette configuration et la contrainte de Cauchy s'écrit :

$$\underset{\sim}{\mathbf{S}}^e = J\underset{\sim}{\mathbf{F}}^{e-1}\underset{\sim}{\sigma}\underset{\sim}{\mathbf{F}}^{e-T} \quad \underset{\sim}{\sigma} = \frac{1}{J}\underset{\sim}{\mathbf{F}}^e\underset{\sim}{\mathbf{S}}^e\underset{\sim}{\mathbf{F}}^{eT}$$

La puissance des efforts intérieurs par unité de masse s'exprime alors, en utilisant la symétrie de $\underset{\sim}{\sigma}$:

$$\begin{aligned}\frac{1}{\rho}\underset{\sim}{\sigma} : \underset{\sim}{\mathbf{D}} &= \frac{1}{\rho}\underset{\sim}{\sigma} : \underset{\sim}{\mathbf{L}} = \frac{1}{\rho}\underset{\sim}{\sigma} : \left(\dot{\underset{\sim}{\mathbf{F}}}\underset{\sim}{\mathbf{F}}^{-1}\right)\\ &= \frac{1}{\rho}\underset{\sim}{\sigma} : \left(\dot{\underset{\sim}{\mathbf{F}}}^e\underset{\sim}{\mathbf{F}}^{e-1}\right) + \frac{1}{\rho}\underset{\sim}{\sigma} : \left(\dot{\underset{\sim}{\mathbf{F}}}^e\dot{\underset{\sim}{\mathbf{F}}}^p\underset{\sim}{\mathbf{F}}^{p-1}\underset{\sim}{\mathbf{F}}^{e-1}\right)\\ &= \frac{1}{\rho_0}\left(\underset{\sim}{\mathbf{S}}^e : \dot{\underset{\sim}{\mathbf{E}}}^e + \left(\underset{\sim}{\mathbf{F}}^{eT}\underset{\sim}{\mathbf{F}}^e\underset{\sim}{\mathbf{S}}^e\right) : \left(\dot{\underset{\sim}{\mathbf{F}}}^p\underset{\sim}{\mathbf{F}}^{p-1}\right)\right)\end{aligned}$$

Inégalité Clausius-Duhem :

$$-\rho(\dot{\Psi} + s\dot{T}) + \underset{\sim}{\sigma} : \underset{\sim}{\mathbf{D}} - \frac{\underline{\mathbf{q}}}{T}.\nabla T \geq 0$$

Nous introduisons le fonction énergie libre $\Psi = \Psi(\underset{\sim}{\mathbf{E}}^e; \alpha_i; T)$. Inégalité Clausius-Duhem se réécrit :

$$\rho\left(\frac{\underset{\sim}{\mathbf{S}}^e}{\rho_0} - \frac{\partial\Psi}{\partial\underset{\sim}{\mathbf{E}}^e}\right) : \dot{\underset{\sim}{\mathbf{E}}}^e - \rho\left(s + \frac{\partial\Psi}{\partial T}\right).\dot{T} - \rho\frac{\partial\Psi}{\partial\alpha_i}\dot{\alpha}_i + \frac{\rho}{\rho_0}\left(\underset{\sim}{\mathbf{F}}^{eT}\underset{\sim}{\mathbf{F}}^e\underset{\sim}{\mathbf{S}}^e\right) : \left(\dot{\underset{\sim}{\mathbf{F}}}^p\underset{\sim}{\mathbf{F}}^{p-1}\right) - \frac{\underline{\mathbf{q}}}{T}.\nabla T \geq 0$$

Où :

$$\frac{\underset{\sim}{\mathbf{S}}^e}{\rho_0} - \frac{\partial\Psi}{\partial\underset{\sim}{\mathbf{E}}^e} = 0$$
$$s + \frac{\partial\Psi}{\partial T} = 0$$
$$\underline{\mathbf{q}} = 0 \quad [1]$$

Donc :

$$\frac{\rho}{\rho_0}\left(\underset{\sim}{\mathbf{F}}^{eT}\underset{\sim}{\mathbf{F}}^e\underset{\sim}{\mathbf{S}}^e\right) : \left(\dot{\underset{\sim}{\mathbf{F}}}^p\underset{\sim}{\mathbf{F}}^{p-1}\right) - \rho\frac{\partial\Psi}{\partial\alpha_i}\dot{\alpha}_i \geq 0$$

Ici, le tenseur $\underset{\sim}{\mathbf{S}}^e$ qui interviendra naturellement dans la loi d'élasticité, et un nouveau tenseur $\underset{\sim}{\mathbf{\Sigma}} = \underset{\sim}{\mathbf{F}}^{eT}\underset{\sim}{\mathbf{F}}^e\underset{\sim}{\mathbf{S}}^e$ - tenseur Mandel, qui devra être utilisé dans les lois d'écoulement. Comme nous avons supposé que le mécanisme de déformation est le glissement cristallographique, nous avons :

$$\dot{\underset{\sim}{\mathbf{F}}}^p\underset{\sim}{\mathbf{F}}^{p-1} = \sum_{s=1}^{N}\dot{\gamma}^s\underset{\sim}{\mathbf{N}}_0^s$$

Où le tenseur $\underset{\sim}{\mathbf{N}}_0^s$ est défini à partir du vecteur normal au plan et du vecteurs dans la direction de glissement dans la configuration isocline, aussi dans la configuration initiale.

$$\underset{\sim}{\mathbf{N}}_0^s = \underline{\mathbf{l}}^s \otimes \underline{\mathbf{n}}^s$$

et :

$$\underset{\sim}{\mathbf{\Sigma}} : \left(\dot{\underset{\sim}{\mathbf{F}}}^p\underset{\sim}{\mathbf{F}}^{p-1}\right) = \underset{\sim}{\mathbf{\Sigma}} : \sum_{s=1}^{N}\dot{\gamma}^s\underset{\sim}{\mathbf{N}}_0^s = \sum_{s=1}^{N}\Sigma : \underset{\sim}{\mathbf{N}}_0^s\dot{\gamma}^s = \sum_{s=1}^{N}\tau^s\dot{\gamma}^s$$

Donc :

$$\tau^s = \underset{\sim}{\mathbf{\Sigma}} : \underset{\sim}{\mathbf{N}}_0^s \quad \text{avec} : \underset{\sim}{\mathbf{\Sigma}} = \underset{\sim}{\mathbf{F}}^{eT}\underset{\sim}{\mathbf{F}}^e\underset{\sim}{\mathbf{S}}^e = \underset{\sim}{\mathbf{C}}^e\underset{\sim}{\mathbf{S}}^e = (\underset{\sim}{\mathbf{I}} + 2\underset{\sim}{\mathbf{E}}^e)\underset{\sim}{\mathbf{S}}^e$$

Cependant, comme la déformation élastique de notre matériaux est négligeable $\underset{\sim}{\mathbf{E}}^e << \underset{\sim}{\mathbf{I}}$***, nous pouvons simplifier le cission résolue en :***

$$\tau^{\mathbf{s}} = \underset{\sim}{\mathbf{S}}^{\mathbf{e}} : \underset{\sim}{\mathbf{N}}_{\mathbf{0}}^{\mathbf{s}}$$

[1] Dans notre cas, il n'y a pas dénergie thermique fournie

D.2 Tenseur du Piola-Kirchhoff

Ici, nous allons clarifier la relation entre tenseur Piola-Kirchhoff dans configuration isocline avec élasticité.

Décomposition polaire du tenseur gradient de la stransformation de la configuration isocline à la configuration actuelle $\underset{\sim}{\mathbf{F}}^e$: $\underset{\sim}{\mathbf{F}}^e = \underset{\sim}{\mathbf{R}}^e\underset{\sim}{\mathbf{U}}^e$ ($\underset{\sim}{\mathbf{R}}^e$ caractérise la rotation, $\underset{\sim}{\mathbf{U}}^e$ la déformation). Nous avons :

$$\underset{\sim}{\mathbf{C}}^* = \underset{\sim}{\mathbf{U}}^{eT}\underset{\sim}{\mathbf{U}} = \underset{\sim}{\mathbf{U}}^{eT}\underset{\sim}{\mathbf{R}}^{eT}\underset{\sim}{\mathbf{R}}\underset{\sim}{\mathbf{U}} = \underset{\sim}{\mathbf{F}}^{eT}\underset{\sim}{\mathbf{F}}^e = \underset{\sim}{\mathbf{C}}$$

$$\Rightarrow \underset{\sim}{\mathbf{E}}^* = \frac{1}{2}(\underset{\sim}{\mathbf{C}}^* - \underset{\sim}{\mathbf{I}}) = \frac{1}{2}(\underset{\sim}{\mathbf{C}} - \underset{\sim}{\mathbf{I}}) = \underset{\sim}{\mathbf{E}}^e$$

Par définition le tenseur de contrainte Piola-Kirchhoff dans la configuration isocline :

$$\underset{\sim}{\mathbf{S}}^e = \underset{\approx}{\mathbf{\Lambda}} : \underset{\sim}{\mathbf{E}}^*$$

Donc :

$$\underset{\sim}{\mathbf{S}}^e = \underset{\approx}{\mathbf{\Lambda}} : \underset{\sim}{\mathbf{E}}^e$$

D.3 Matrice tangente

Dans notre calcul, la configuration référence est la configuration au début de chaque incrément. Donc par définition la matrice tangente $\underset{\sim}{\mathbf{C}}$ est :

$$\underset{\sim}{\sigma}^{\nabla} = \underset{\sim}{\mathbf{C}} : \underset{\sim}{\mathbf{D}}$$

$$\underset{\sim}{\sigma}^{\nabla} dt = \underset{\sim}{\mathbf{C}} : \underset{\sim}{\mathbf{D}} dt$$

$$\underset{\sim}{\mathbf{C}} = \frac{\partial(\underset{\sim}{\sigma}^{\nabla} dt)}{\partial(\underset{\sim}{\mathbf{D}} dt)}$$

• $\underset{\sim}{\sigma}^{\nabla}$ Taux de contrainte Truesdell est défini par la Piola transformation du temps dérivé de contrainte Piola-Kirchhoff :

$$\begin{aligned}
\underset{\sim}{\sigma}^{\nabla} &= J^{-1}\phi_*[\dot{\underset{\sim}{\mathbf{S}}}] = J^{-1}\underset{\sim}{\mathbf{F}}^e \left[\frac{d}{dt}(J\underset{\sim}{\mathbf{F}}^{e-1}\underset{\sim}{\sigma}\underset{\sim}{\mathbf{F}}^{e-T})\right]\underset{\sim}{\mathbf{F}}^{eT} \\
\underset{\sim}{\sigma}^{\nabla} &= J^{-1}\underset{\sim}{\mathbf{F}}^e \left[\frac{d}{dt}(\underset{\sim}{\mathbf{S}})\right]\underset{\sim}{\mathbf{F}}^{eT} \\
\underset{\sim}{\sigma}^{\nabla} &= J^{-1}\underset{\sim}{\mathbf{F}}^e \left[\frac{d}{dt}(\underset{\sim}{\underset{\sim}{\mathbf{\Lambda}}} : \underset{\sim}{\mathbf{E}}^e)\right]\underset{\sim}{\mathbf{F}}^{eT} \\
\underset{\sim}{\sigma}^{\nabla} dt &= J^{-1}\underset{\sim}{\mathbf{F}}^e \left[\underset{\sim}{\underset{\sim}{\mathbf{\Lambda}}} : \Delta\underset{\sim}{\mathbf{E}}^e\right]\underset{\sim}{\mathbf{F}}^{eT} \\
\Rightarrow \quad \underset{\sim}{\mathbf{C}} &= \frac{\partial(\underset{\sim}{\sigma}^{\nabla} dt)}{\partial(\underset{\sim}{\mathbf{D}} dt)} = J^{-1}\underset{\sim}{\mathbf{F}}^e \left[\underset{\sim}{\underset{\sim}{\mathbf{\Lambda}}} : \frac{\partial\Delta\underset{\sim}{\mathbf{E}}^e}{\partial(\underset{\sim}{\mathbf{D}} dt)}\right]\underset{\sim}{\mathbf{F}}^{eT}
\end{aligned} \tag{D.1}$$

• **Considérons maintenant deux configurations t et $t+\Delta t$,** le tenseur gradient de déformation se décompose en partie plastique et élastique $\underset{\sim}{\mathbf{F}}_t = \underset{\sim}{\mathbf{F}}^e_t \underset{\sim}{\mathbf{F}}^p_t$. Nous avons :

$$\begin{aligned}
\underset{\sim}{\mathbf{E}}_t &= \underset{\sim}{\mathbf{D}}.\Delta t \\
\underset{\sim}{\mathbf{F}}^p_t &= \underset{\sim}{\mathbf{I}} + \sum \Delta\gamma^s . \underset{\sim}{\mathbf{N}}^s
\end{aligned}$$

$\Rightarrow$

$$\begin{aligned}
\underset{\sim}{\mathbf{E}}_t &= \frac{1}{2}\left[(\underset{\sim}{\mathbf{F}}^e_t \underset{\sim}{\mathbf{F}}^p_t)^T \underset{\sim}{\mathbf{F}}^e_t \underset{\sim}{\mathbf{F}}^p_t - \underset{\sim}{\mathbf{I}}\right] \\
\underset{\sim}{\mathbf{E}}_t &= \frac{1}{2}(\underset{\sim}{\mathbf{I}} + \sum \Delta\gamma^s . \underset{\sim}{\mathbf{N}}^s)^T \underset{\sim}{\mathbf{F}}^{eT}_t \underset{\sim}{\mathbf{F}}^e_t (\underset{\sim}{\mathbf{I}} + \sum \Delta\gamma^s . \underset{\sim}{\mathbf{N}}^s) - \underset{\sim}{\mathbf{I}} \\
\underset{\sim}{\mathbf{E}}_t &\approx \frac{1}{2}\underset{\sim}{\mathbf{F}}^{eT}_t \underset{\sim}{\mathbf{F}}^e_t - \underset{\sim}{\mathbf{I}} + \sum \Delta\gamma^s . \{\underset{\sim}{\mathbf{F}}^{eT}_t \underset{\sim}{\mathbf{F}}^e_t \underset{\sim}{\mathbf{N}}^s\} \\
\underset{\sim}{\mathbf{E}}_t &= \underset{\sim}{\mathbf{E}}^e_t + \sum \Delta\gamma^s . \{\underset{\sim}{\mathbf{C}}^e_t \underset{\sim}{\mathbf{N}}^s\}
\end{aligned}$$

Notons que : $\underset{\sim}{\mathbf{D}}.\Delta t = \underset{\sim}{\mathbf{E}}_t$ et avec petite déformation élastique $\underset{\sim}{\mathbf{E}}^e_t = \Delta\underset{\sim}{\mathbf{E}}^e$. Souvenons nous la formule de $\underset{\sim}{\mathbf{E}}^*$:

$$
\begin{aligned}
\underset{\sim}{\mathbf{E}}^{*} &= \underset{\sim}{\mathbf{E}}^{e}_{n+1} + \sum \Delta\gamma^{s}.\{\underset{\sim}{\mathbf{C}}^{e}_{n+1}\underset{\sim}{\mathbf{N}}^{s}\} \\
f_vec_eel &= \underset{\sim}{\mathbf{E}}^{e}_{n+1} - \underset{\sim}{\mathbf{E}}^{*} + \sum \Delta\gamma^{s}.\{\underset{\sim}{\mathbf{C}}^{e}_{n+1}\underset{\sim}{\mathbf{N}}^{s}\} \\
f_vec_eel &= \underset{\sim}{\mathbf{E}}^{e}_{n} + \Delta\underset{\sim}{\mathbf{E}}^{e} - \underset{\sim}{\mathbf{E}}^{*} + \sum \Delta\gamma^{s}.\{(\underset{\sim}{\mathbf{C}}^{e}_{n} + \underset{\sim}{\mathbf{C}}^{e}_{t}) + \underset{\sim}{\mathbf{N}}^{s}\} \\
f_vec_eel &= \underset{\sim}{\mathbf{E}}^{e}_{n} + \left[\Delta\underset{\sim}{\mathbf{E}}^{e} + \sum \Delta\gamma^{s}.\{\underset{\sim}{\mathbf{C}}^{e}_{t}\underset{\sim}{\mathbf{N}}^{s}\}\right] - \underset{\sim}{\mathbf{E}}^{*} + \sum \Delta\gamma^{s}.\{\underset{\sim}{\mathbf{C}}^{e}_{n}\underset{\sim}{\mathbf{N}}^{s}\} \\
f_vec_eel &= \underset{\sim}{\mathbf{E}}^{e}_{n} + \underset{\sim}{\mathbf{D}}dt - \underset{\sim}{\mathbf{E}}^{*} + \sum \Delta\gamma^{s}.\{\underset{\sim}{\mathbf{C}}^{e}_{n}\underset{\sim}{\mathbf{N}}^{s}\}
\end{aligned}
$$

$\Rightarrow$

$$
\frac{\partial f_vec_eel}{\partial \Delta\underset{\sim}{\mathbf{E}}^{e}} = \frac{\partial \underset{\sim}{\mathbf{D}}.dt}{\partial \Delta\underset{\sim}{\mathbf{E}}^{e}}
$$

$$
\frac{\partial \Delta\underset{\sim}{\mathbf{E}}^{e}}{\partial \underset{\sim}{\mathbf{D}}.dt} = \left[\frac{\partial f_vec_eel}{\partial \Delta\underset{\sim}{\mathbf{E}}^{e}}\right]^{-1} = \underset{\sim}{\mathbf{H}}(psz, psz, f_grad, 0, 0)
$$

Revenons l'équation D.1 :

$$
\underset{\sim}{\mathbf{C}} = \frac{\partial(\underset{\sim}{\sigma}^{\nabla}dt)}{\partial(\underset{\sim}{\mathbf{D}}dt)} = J^{-1}\underset{\sim}{\mathbf{F}}^{e}\left[\underset{\sim}{\mathbf{\Lambda}} : \frac{\partial \Delta\underset{\sim}{\mathbf{E}}^{e}}{\partial(\underset{\sim}{\mathbf{D}}dt)}\right]\underset{\sim}{\mathbf{F}}^{eT} = J^{-1}\underset{\sim}{\mathbf{F}}^{e}\left[\underset{\sim}{\mathbf{\Lambda}} : \underset{\sim}{\mathbf{H}}\right]\underset{\sim}{\mathbf{F}}^{eT} \tag{D.2}
$$

Annexe E

E.1 Matrice jacobienne

E.1.1 Modèles Kocks-Rauch

E.1.1.1 Petite déformation, intégration implicite

Les variables : $\underset{\sim}{\varepsilon}^e$, γ^s, $r^s = \rho^s.b^2$

$$\left\{\begin{array}{lcl} \Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^e_k & = & \Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^t_k - \sum\limits_s \Delta\gamma^s_k.\underset{\sim}{\mathbf{N}}^s \\ \Delta\gamma^s_k & = & sign(\tau^s).\dot{\gamma}_0 \exp\left(-\dfrac{\Delta G_0}{kT}\left(1-\left(\dfrac{\tau^s_{eff}(t+\Delta t)}{\tau_R}\right)^p\right)^q\right).\Delta t \\ \Delta r^s_k & = & \Delta\gamma^s_k\left(\dfrac{b}{d} + \dfrac{\sqrt{\sum\limits_{u\neq s}(r^u_t + \Delta r^u)}}{K} - \dfrac{g_c\,(r^s_t + \Delta r^e)}{b}\right) \end{array}\right.$$

Les résidus :

$$\left\{\begin{array}{lcl} R_k^{\Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^e_k} & = & \Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^e_k - \Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^t_k + \sum\limits_s \Delta\gamma^s_t.\underset{\sim}{\mathbf{N}}^s \\ R_k^{\Delta\gamma^s_k} & = & \Delta\gamma^s_k - sign(\tau^s).\dot{\gamma}_0 \exp\left(-\dfrac{\Delta G_0}{kT}\left(1-\left(\dfrac{\tau^s_{eff}(t+\Delta t)}{\tau_R}\right)^p\right)^q\right).\Delta t \\ R_k^{\Delta r^s_k} & = & \Delta r^s_k - \Delta\gamma^s_k\left(\dfrac{b}{d} + \dfrac{\sqrt{\sum\limits_{u\neq s}(r^u_t + \Delta r^u)}}{K} - \dfrac{g_c\,(r^s_t + \Delta r^e)}{b}\right) \end{array}\right.$$

Avec :

$$\tau^s_{eff}(t+\Delta t) = \left|(\underset{\sim}{\varepsilon}^e_t + \Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^e) : \underset{\approx}{\mathbf{\Lambda}} : \underset{\sim}{\mathbf{N}}^s\right| - \tau_0 - \frac{\mu^2 \sum\limits_{u\neq s}(r^u_t + \Delta r^u)}{\left|(\underset{\sim}{\varepsilon}^e_t + \Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^e) : \underset{\approx}{\mathbf{\Lambda}} : \underset{\sim}{\mathbf{N}}^s\right| - \tau_0}$$

Les composants de la matrice jacobienne

- $R_k^{\Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^e_k} = \Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^e_k - \Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^t_k + \sum\limits_s \Delta\gamma^s_k.\underset{\sim}{\mathbf{N}}^s$

$$\begin{array}{lcll} deel_deel & = & \dfrac{\partial R^{\Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^e}}{\partial\Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^e} & = \underset{\approx}{\mathbf{I}} \\ deel_dgvcum\,[s] & = & \dfrac{\partial R^{\Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^e}}{\partial\Delta\gamma^s} & = \underset{\sim}{\mathbf{N}}^s \\ deel_dr\,[s] & = & \dfrac{\partial R^{\Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^e}}{\partial\Delta r^s} & = 0 \end{array}$$

- $R_k^{\Delta\gamma^s_t} = \Delta\gamma^s_k - sign(\tau^s).\dot{\gamma}_0 \exp\left(-\dfrac{\Delta G_0}{kT}\left(1-\left(\dfrac{\tau^s_{eff}(t+\Delta t)}{\tau_R}\right)^p\right)^q\right).\Delta t$

  On pose :

$$
\begin{aligned}
coef &= -\frac{\partial R_k^{\Delta\gamma_k^s}}{\partial \tau_{eff}} \\
&= \dot{\gamma}_0 \exp\left(-\frac{\Delta G_0}{kT}\left(1-\left(\frac{\tau_{eff}^s}{\tau_R}\right)^p\right)^q\right) \\
&\times -\frac{\Delta G_0}{kT}.q.\left(1-\left(\frac{\tau_{eff}^s}{\tau_R}\right)^p\right)^{q-1} \\
&\times -1.p.\left(\frac{\tau_{eff}^s}{\tau_R}\right)^{p-1}.\frac{1}{\tau_R}.\Delta t.sign(\tau^s)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
dgvcum_deel_{(i,j)} &= \frac{\partial R_k^{\Delta\gamma_k^s}}{\partial \tau_{eff}}.\frac{\partial \tau_{eff}}{\partial \Delta \underset{\sim}{\varepsilon}^e} \\
&= -coef.\left(1-\frac{\mu^2\left(\sum\limits_{u\neq s} a_{su}(r_t^u+\Delta r^u)\right)}{\left(\left|(\underset{\sim}{\varepsilon}_t^e+\Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^e):\underset{\approx}{\mathbf{\Lambda}}:\underset{\sim}{\mathbf{N}}^s\right|-\tau_0\right)^2}\right).\underset{\approx}{\mathbf{\Lambda}}:\underset{\sim}{\mathbf{N}}^s.sign(\tau^s)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
dgvcum_dgvcum(s,u) &= \frac{\partial R_k^{\Delta\gamma_k^s}}{\partial \Delta\gamma^u} = \delta_{su}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
dgvcum_r(s,u) &= \frac{\partial R_k^{\Delta\gamma_k^s}}{\partial \tau_{eff}}.\frac{\partial \tau_{eff}}{\partial \Delta r^u} \\
&= -coef.(-1).\frac{a_{su}.(1.-\delta_{su}).\mu^2}{\left(\left|(\underset{\sim}{\varepsilon}_t^e+\Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^e):\underset{\approx}{\mathbf{\Lambda}}:\underset{\sim}{\mathbf{N}}^s\right|-\tau_0\right)}
\end{aligned}
$$

- $R_k^{\Delta r_k^s} = \Delta r_k^s - \Delta\gamma_k^s\left(\frac{b}{d}+\frac{\sqrt{\sum\limits_{u\neq s}(r_t^u+\Delta r^u)}}{K}-\frac{g_c\,(r_t^s+\Delta r^e)}{b}\right)$

$$
\begin{aligned}
dr_deel_{(ij)} &= \frac{\partial R_k^{\Delta r_k^s}}{\partial \Delta\varepsilon_{ij}} = 0 \\
dr_dgvcum(s,u) &= \frac{\partial R_k^{\Delta r_k^s}}{\partial \Delta\gamma_u} = -\delta_{su}.\left(\frac{b}{d}+\frac{\sqrt{\sum\limits_{u\neq s}(r_t^u+\Delta r^u)}}{K}-\frac{g_c(r_k^s+\Delta r_k^s)}{b}\right) \\
dr_dr(s,u) &= \frac{\partial R_k^{\Delta r_k^s}}{\partial \Delta r_u} = \delta_{su}-\Delta\gamma_k^s\left(\frac{1-\delta_{su}}{2K\sqrt{\sum\limits_{u\neq s}(r_t^u+\Delta r^u)}}-\frac{g_c.\theta.\delta_{su}}{b}\right)
\end{aligned}
$$

Les valeurs à la $k+1$ ième de l'itération :

$$
\begin{pmatrix} \Delta\underset{\approx}{\varepsilon}_{k+1} \\ \Delta\gamma_{k+1} \\ \Delta r_{k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Delta\underset{\approx}{\varepsilon}_k \\ \Delta\gamma_k \\ \Delta r_k \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \left[\frac{\partial R_k^{\Delta\underset{\approx}{\varepsilon}}}{\partial\Delta\underset{\approx}{\varepsilon}}\right] & \left[\frac{\partial R_k^{\Delta\underset{\approx}{\varepsilon}}}{\partial\Delta\gamma}\right] & \left[\frac{\partial R_k^{\Delta\underset{\approx}{\varepsilon}}}{\partial\Delta r}\right] \\ \left[\frac{\partial R_k^{\Delta\gamma}}{\partial\Delta\underset{\approx}{\varepsilon}}\right] & \left[\frac{\partial R_k^{\Delta\gamma}}{\partial\Delta\gamma}\right] & \left[\frac{\partial R_k^{\Delta\gamma}}{\partial\Delta r}\right] \\ \left[\frac{\partial R_k^{\Delta r}}{\partial\Delta\underset{\approx}{\varepsilon}}\right] & \left[\frac{\partial R_k^{\Delta r}}{\partial\Delta\gamma}\right] & \left[\frac{\partial R_k^{\Delta r}}{\partial\Delta r}\right] \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} R_k^{\Delta\underset{\approx}{\varepsilon}} \\ R_k^{\Delta\gamma} \\ R_k^{\Delta r} \end{pmatrix}
$$

E.1.1.2 Grande déformation, intégration implicite

Les variables : $\underset{\sim}{\mathbf{E}}^e$, γ^s, $r^s = \rho^s.b^2$

$$\left\{\begin{array}{lcl} \underset{\sim}{\mathbf{E}}^*_t & = & \underset{\sim}{\mathbf{E}}^e_t + \Delta\underset{\sim}{\mathbf{E}}^e_k + \sum_s \Delta\gamma^s_k.\{\underset{\sim}{\mathbf{N}}^s.\underset{\sim}{\mathbf{C}}^e_k\} \\ \Delta\gamma^s_k & = & \dot{\gamma}_0 \exp\left(-\dfrac{\Delta G_0}{kT}\left(1-\left(\dfrac{\tau^s_{eff}(t+\Delta t)}{\tau_R}\right)^p\right)^q\right).\Delta t.sign(\tau^s) \\ \Delta r^s_k & = & \Delta\gamma^s_k\left(\dfrac{b}{d} + \dfrac{\sqrt{\sum_{u\neq s}(r^u_t+\Delta r^u)}}{K} - \dfrac{g_c\,(r^s_t+\Delta r^e)}{b}\right) \end{array}\right.$$

Les résidus :

$$\left\{\begin{array}{lcl} R_k^{\Delta\underset{\sim}{\mathbf{E}}^e_k} & = & \underset{\sim}{\mathbf{E}}^e_t + \Delta\underset{\sim}{\mathbf{E}}^e_k - \underset{\sim}{\mathbf{E}}^*_t + \sum_s \Delta\gamma^s_t.\{\underset{\sim}{\mathbf{N}}^s.\underset{\sim}{\mathbf{C}}^e_k\} \\ R_k^{\Delta\gamma^s_k} & = & \Delta\gamma^s_k - \dot{\gamma}_0 \exp\left(-\dfrac{\Delta G_0}{kT}\left(1-\left(\dfrac{\tau^s_{eff}(t+\Delta t)}{\tau_R}\right)^p\right)^q\right).\Delta t.sign(\tau^s) \\ R_k^{\Delta r^s_k} & = & \Delta r^s_k - \Delta\gamma^s_k\left(\dfrac{b}{d} + \dfrac{\sqrt{\sum_{u\neq s}(r^u_t+\Delta r^u)}}{K} - \dfrac{g_c\,(r^s_t+\Delta r^e)}{b}\right) \end{array}\right.$$

Avec :

$$\tau^s_{eff}(t+\Delta t) = \left|(\underset{\sim}{\mathbf{E}}^e_t + \Delta\underset{\sim}{\mathbf{E}}^e_k) : \underset{\approx}{\mathbf{\Lambda}} : \underset{\sim}{\mathbf{N}}^s\right| - \tau_0 - \frac{\mu^2\left(\sum_{u\neq s} a_{su}(r^u_t+\Delta r^u)\right)}{\left|(\underset{\sim}{\mathbf{E}}^e + \Delta\underset{\sim}{\mathbf{E}}^e_k) : \underset{\approx}{\mathbf{\Lambda}} : \underset{\sim}{\mathbf{N}}^s\right| - \tau_0}$$

Les composants de la matrice jacobienne

- $R_k^{\Delta\underset{\sim}{\mathbf{E}}^e_k} = \underset{\sim}{\mathbf{E}}^e_t + \Delta\underset{\sim}{\mathbf{E}}^e_k - \underset{\sim}{\mathbf{E}}^*_t + \sum_s \Delta\gamma^s_k.\{\underset{\sim}{\mathbf{N}}^s.\underset{\sim}{\mathbf{C}}^e_k\}$

$$\begin{array}{lcl} deel_deel & = & \dfrac{\partial R^{\Delta\underset{\sim}{\mathbf{E}}^e}}{\partial\underset{\sim}{\mathbf{E}}^e} = \underset{\approx}{\mathbf{I}} + 2\sum_{s=1}^N\{\underset{\sim}{\mathbf{N}}^s\underset{\approx}{\mathbf{I}}\}.\Delta\gamma^s_k \\ deel_dgvcum\,[s] & = & \dfrac{\partial R^{\Delta\underset{\sim}{\mathbf{E}}^e}}{\partial\Delta\gamma^s} = \{\underset{\sim}{\mathbf{N}}^s\underset{\sim}{\mathbf{C}}_k\} \\ deel_dr\,[s] & = & \dfrac{\partial R^{\Delta\underset{\sim}{\mathbf{E}}^e}}{\partial\Delta r^s} = 0 \end{array}$$

- $R_k^{\Delta\gamma^s_t} = \Delta\gamma^s_k - \dot{\gamma}_0 \exp\left(-\dfrac{\Delta G_0}{kT}\left(1-\left(\dfrac{\tau^s_{eff}(t+\Delta t)}{\tau_R}\right)^p\right)^q\right).\Delta t.sign(\tau^s)$

On pose :

$$\begin{array}{rl} coef & = -\dfrac{\partial R_k^{\Delta\gamma^s_k}}{\partial\tau_{eff}} \\ & = \dot{\gamma}_0 \exp\left(-\dfrac{\Delta G_0}{kT}\left(1-\left(\dfrac{\tau^s_{eff}}{\tau_R}\right)^p\right)^q\right) \\ & \times -\dfrac{\Delta G_0}{kT}.q.\left(1-\left(\dfrac{\tau^s_{eff}}{\tau_R}\right)^p\right)^{q-1} \\ & \times -1.p.\left(\dfrac{\tau^s_{eff}}{\tau_R}\right)^{p-1}.\dfrac{1}{\tau_R}.\Delta t.sign(\tau^s) \end{array}$$

$$
\begin{aligned}
dgvcum_deel_{(i,j)} &= \frac{\partial R_k^{\Delta\gamma_k^s}}{\partial \tau_{eff}} . \frac{\partial \tau_{eff}}{\partial \Delta \underset{\sim}{\mathbf{E}}^e} \\
&= -coef. \left(1 - \frac{\mu^2 \left(\sum\limits_{u \neq s} a_{su} (r_t^u + \Delta r^u) \right)}{\left(\left| \left(\underset{\sim}{\mathbf{E}}_t^e + \Delta \underset{\sim}{\mathbf{E}}^e \right) : \underset{\approx}{\mathbf{\Lambda}} : \underset{\sim}{\mathbf{N}}^s \right| - \tau_0 \right)^2} \right) . \underset{\approx}{\mathbf{\Lambda}} : \underset{\sim}{\mathbf{N}}^s . sign(\tau^s) \\
dgvcum_dgvcum(s,u) &= \frac{\partial R_k^{\Delta\gamma_k^s}}{\partial \Delta \gamma^u} = \delta_{su} \\
dgvcum_r(s,u) &= \frac{\partial R_k^{\Delta\gamma_k^s}}{\partial \tau_{eff}} . \frac{\partial \tau_{eff}}{\partial \Delta r^u} = -coef.(-1). \frac{a_{su} . \delta_{su}}{\left| \left(\underset{\sim}{\mathbf{E}}_t^e + \Delta \underset{\sim}{\mathbf{E}}^e \right) : \underset{\approx}{\mathbf{\Lambda}} : \underset{\sim}{\mathbf{N}}^s \right| - \tau_0}
\end{aligned}
$$

- $R_k^{\Delta r_k^s} = \Delta r_k^s - \Delta \gamma_k^s \left(\dfrac{b}{d} + \dfrac{\sqrt{\sum\limits_{u \neq s} (r_t^u + \Delta r^u)}}{K} - \dfrac{g_c \left(r_t^s + \Delta r^e \right)}{b} \right)$

$$
\begin{aligned}
dr_deel_{(ij)} &= \frac{\partial R_k^{\Delta r_k^s}}{\partial \Delta \underset{\sim}{\mathbf{E}}_{ij}} = 0 \\
dr_dgvcum(s,u) &= \frac{\partial R_k^{\Delta r_k^s}}{\partial \Delta \gamma_u} = -\delta_{su} . \left(\frac{b}{d} + \frac{\sqrt{\sum\limits_{u \neq s} (r_t^u + \Delta r^u)}}{K} - \frac{g_c (r_k^s + \Delta r_k^s)}{b} \right) . \\
dr_dr(s,u) &= \frac{\partial R_k^{\Delta r_k^s}}{\partial \Delta r_u} = \delta_{su} - \Delta \gamma_k^s \left(\frac{1}{2K \sqrt{\sum\limits_{u \neq s} a_{su} (r_t^u + \Delta r^u)}} - \frac{g_c . \theta . \delta_{su}}{b} \right)
\end{aligned}
$$

Les valeurs à la $k+1$ ième de l'itération :

$$
\begin{pmatrix} \Delta \underset{\sim}{\mathbf{E}}_{k+1}^e \\ \Delta \gamma_{k+1} \\ \Delta r_{k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Delta \underset{\sim}{\mathbf{E}}_k^e \\ \Delta \gamma_k \\ \Delta r_k \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \left[\dfrac{\partial R_k^{\Delta \underset{\sim}{\mathbf{E}}^e}}{\partial \Delta \underset{\sim}{\mathbf{E}}^e} \right] & \left[\dfrac{\partial R_k^{\Delta \underset{\sim}{\mathbf{E}}^e}}{\partial \Delta \gamma} \right] & \left[\dfrac{\partial R_k^{\Delta \underset{\sim}{\mathbf{E}}^e}}{\partial \Delta r} \right] \\ \left[\dfrac{\partial R_k^{\Delta \gamma}}{\partial \Delta \underset{\sim}{\mathbf{E}}^e} \right] & \left[\dfrac{\partial R_k^{\Delta \gamma}}{\partial \Delta \gamma} \right] & \left[\dfrac{\partial R_k^{\Delta \gamma}}{\partial \Delta r} \right] \\ \left[\dfrac{\partial R_k^{\Delta r}}{\partial \Delta \underset{\sim}{\mathbf{E}}^e} \right] & \left[\dfrac{\partial R_k^{\Delta r}}{\partial \Delta \gamma} \right] & \left[\dfrac{\partial R_k^{\Delta r}}{\partial \Delta r} \right] \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} R_k^{\Delta \underset{\sim}{\mathbf{E}}^e} \\ R_k^{\Delta \gamma} \\ R_k^{\Delta r} \end{pmatrix}
$$

E.1.2 Modèles Tabourot

E.1.2.1 Petite déformation, intégration implicite

Les variables : $\underset{\sim}{\varepsilon}^e$, γ^s, $r^s = \rho^s . b^2$

$$\left\{\begin{array}{lcl} \Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^e_k & = & \Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^t_k - \sum\limits_s \Delta\gamma^s_k.\underset{\sim}{\mathbf{N}}^s \\ \Delta\gamma^s_k & = & \dot{\gamma}_0 \left(\dfrac{\left|\underset{\sim}{\mathbf{N}}^s : \underset{\approx}{\mathbf{\Lambda}} : (\underset{\sim}{\varepsilon}^e_t + \Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^e_k)\right|}{\alpha\mu\sqrt{\sum\limits_{p=1}^{N} d^{sp}(r^p_t + \Delta r^p_k)}} \right)^{1/m} .\Delta t.sign(\tau^s) \\ \Delta r^s_k & = & \left(\dfrac{\sqrt{\sum\limits_{p=1}^{N} a^{sp}(r^p_t + \Delta r^p_k)}}{K} - 2\dfrac{y_c}{b}(r^s_t + \Delta r^s_k) \right) \Delta\gamma^s_k \end{array}\right.$$

Les résidus :

$$\left\{\begin{array}{lcl} R^{\Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^e_k}_k & = & \Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^e_k - \Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^t_k + \sum\limits_s \Delta\gamma^s_k.\underset{\sim}{\mathbf{N}}^s \\ R^{\Delta\gamma^z_k}_k & = & \Delta\gamma^s_k - \dot{\gamma}_0 \left(\dfrac{\left|\underset{\sim}{\mathbf{N}}^s : \underset{\approx}{\mathbf{\Lambda}} : (\underset{\sim}{\varepsilon}^e_t + \Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^e_k)\right|}{\alpha\mu\sqrt{\sum\limits_{p=1}^{N} d^{sp}(r^p_t + \Delta r^p_k)}} \right)^{1/m} \Delta t.sign(\tau^s) \\ R^{\Delta r^s_k}_k & = & \Delta r^s_k - \left(\dfrac{\sqrt{\sum\limits_{p=1}^{N} a^{sp}(r^p_t + \Delta r^p_k)}}{K} - 2\dfrac{y_c}{b}(r^s_t + \Delta r^s_k) \right) \Delta\gamma^s_k \end{array}\right.$$

Les composants de la matrice jacobienne

- $R^{\Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^e_k}_k = \Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^e_k - \Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^t_k + \sum\limits_s \Delta\gamma^s_k.\underset{\sim}{\mathbf{N}}^s$

$$\begin{array}{lcll} deel_deel & = & \dfrac{\partial R^{\Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^e}}{\partial\Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^e} & = \underset{\approx}{\mathbf{I}} \\ deel_dgvcum\,[s] & = & \dfrac{\partial R^{\Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^e}}{\partial\Delta\gamma^s_k} & = \underset{\sim}{\mathbf{N}}^s \\ deel_dr\,[s] & = & \dfrac{\partial R^{\Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^e}}{\partial\Delta r^s} & = 0 \end{array}$$

- $R^{\Delta\gamma^z_k}_k = \Delta\gamma^s_k - \dot{\gamma}_0 \left(\dfrac{\left|\underset{\sim}{\mathbf{N}}^s : \underset{\approx}{\mathbf{\Lambda}} : (\underset{\sim}{\varepsilon}^e_t + \Delta\underset{\sim}{\varepsilon}^e_k)\right|}{\alpha\mu\sqrt{\sum\limits_{p=1}^{N} d^{sp}(r^p_t + \Delta r^p_k)}} \right)^{1/m} \Delta t.sign(\tau^s)$

$$dgvcum_deel = \frac{\partial R_k^{\Delta\gamma}}{\partial \Delta \underset{\sim}{\varepsilon}^e} = -\dot{\gamma}_0 \times \frac{1}{m} \left(\frac{\left| \underset{\sim}{\mathbf{N}}^s : \underset{\approx}{\mathbf{\Lambda}} : (\underset{\sim}{\varepsilon}_t^e + \Delta \underset{\sim}{\varepsilon}_k^e) \right|}{\alpha\mu \sqrt{\sum_{p=1}^{N} d^{sp}(r_t^p + \Delta r_k^p)}} \right)^{\frac{1-m}{m}} \Delta t \times \left(\frac{\underset{\approx}{\mathbf{\Lambda}} : \underset{\sim}{\mathbf{N}}^s}{\alpha\mu \sqrt{\sum_{p=1}^{N} d^{sp}(r_t^p + \Delta r_k^p)}} \right) . (sign(\tau^s))^2$$

$$dgvcum_dgvcum_{su} = \frac{\partial R_k^{\Delta\gamma}}{\partial \Delta\gamma} = \delta_{su}$$

$$dgvcum_dr_{su} = \frac{\partial R_k^{\Delta\gamma}}{\partial \Delta r} = -\dot{\gamma}_0 \times \frac{1}{m} \left(\frac{\left| \underset{\sim}{\mathbf{N}}^s : \underset{\approx}{\mathbf{\Lambda}} : (\underset{\sim}{\varepsilon}_t^e + \Delta \underset{\sim}{\varepsilon}_k^e) \right|}{\alpha\mu \sqrt{\sum_{p=1}^{N} d^{sp}(r_t^p + \Delta r_k^p)}} \right)^{\frac{1-m}{m}} \Delta t \times -\frac{1}{2} \left(\frac{\left| \underset{\sim}{\mathbf{N}}^s : \underset{\approx}{\mathbf{\Lambda}} : (\underset{\sim}{\varepsilon}_t^e + \Delta \underset{\sim}{\varepsilon}_k^e) \right|}{\alpha\mu \left(\sqrt{\sum_{p=1}^{N} d^{sp}(r_t^p + \Delta r_k^p)} \right)^3} \right) d^{up}.sign(\tau^s)$$

- $R_k^{\Delta r_k^s} = \Delta r_k^s - \left(\frac{\sqrt{\sum_{p=1}^{N} a^{sp}(r_t^p + \Delta r_k^p)}}{K} - 2\frac{y_c}{b}(r_t^s + \Delta r_k^s) \right) \Delta\gamma_k^s$

$$dr_deel = \frac{\partial R_k^{\Delta r_k^s}}{\partial \Delta \underset{\sim}{\varepsilon}^e} = 0$$

$$dr_dgvcum_{su} = \frac{\partial R_k^{\Delta r_k^s}}{\partial \Delta\gamma_u} = -\delta_{su} \left(\frac{\sqrt{\sum_{p=1}^{N} a^{sp}(r_t^p + \Delta r_k^p)}}{K} - 2\frac{y_c}{b}(r_t^s + \Delta r_k^s) \right)$$

$$dr_dr_{su} = \frac{\partial R_k^{\Delta r_k^s}}{\partial \Delta r_u} = \delta_{su} - \left(\frac{a^{su}}{2K\sqrt{\sum_{p=1}^{N} a^{sp}(r_t^p + \Delta r_k^p)}} - 2\frac{y_c}{b}\delta_{su} \right) \Delta\gamma_k^s$$

Les valeurs à la $k+1$ ième de l'itération :

$$\begin{pmatrix} \Delta\underset{\sim}{\varepsilon}_{k+1} \\ \Delta\gamma_{k+1} \\ \Delta r_{k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Delta\underset{\sim}{\varepsilon}_{k} \\ \Delta\gamma_{k} \\ \Delta r_{k} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \left[\frac{\partial R_k^{\Delta\underset{\sim}{\varepsilon}}}{\partial\Delta\underset{\sim}{\varepsilon}}\right] & \left[\frac{\partial R_k^{\Delta\underset{\sim}{\varepsilon}}}{\partial\Delta\gamma}\right] & \left[\frac{\partial R_k^{\Delta\underset{\sim}{\varepsilon}}}{\partial\Delta r}\right] \\ \left[\frac{\partial R_k^{\Delta\gamma}}{\partial\Delta\underset{\sim}{\varepsilon}}\right] & \left[\frac{\partial R_k^{\Delta\gamma}}{\partial\Delta\gamma}\right] & \left[\frac{\partial R_k^{\Delta\gamma}}{\partial\Delta r}\right] \\ \left[\frac{\partial R_k^{\Delta r}}{\partial\Delta\underset{\sim}{\varepsilon}}\right] & \left[\frac{\partial R_k^{\Delta r}}{\partial\Delta\gamma}\right] & \left[\frac{\partial R_k^{\Delta r}}{\partial\Delta r}\right] \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} R_k^{\Delta\underset{\sim}{\varepsilon}} \\ R_k^{\Delta\gamma} \\ R_k^{\Delta r} \end{pmatrix}$$

E.1.2.2 Grande déformation, intégration implicite

Les variables : $\underset{\sim}{\mathbf{E}}^e$, γ^s, $r^s = \rho^s.b^2$

$$\begin{cases} \underset{\sim}{\mathbf{E}}_t^* &= \underset{\sim}{\mathbf{E}}_t^e + \Delta\underset{\sim}{\mathbf{E}}_k^e + \sum\limits_s \Delta\gamma_k^s.\{\underset{\sim}{\mathbf{N}}^s.\underset{\sim}{\mathbf{C}}_k^e\} \\ \Delta\gamma_k^s &= \dot{\gamma}_0 \left(\frac{\left| \underset{\sim}{\mathbf{N}}^s : \underset{\approx}{\mathbf{\Lambda}} : (\underset{\sim}{\mathbf{E}}_t^e + \Delta\underset{\sim}{\mathbf{E}}_k^e) \right|}{\alpha\mu\sqrt{\sum\limits_{p=1}^{N} d^{sp}(r_t^p + \Delta r_k^p)}} \right)^{1/m} \Delta t.sign(\tau^s) \\ \Delta r_k^s &= \left(\frac{\sqrt{\sum\limits_{p=1}^{N} a^{sp}(r_t^p + \Delta r_k^p)}}{K} - 2\frac{y_c}{b}(r_t^s + \Delta r_k^s) \right) \Delta\gamma_k^s \end{cases}$$

Les résidus :

$$\begin{cases} R_k^{\Delta\underset{\sim}{\mathbf{E}}_k^e} &= \underset{\sim}{\mathbf{E}}_t^e + \Delta\underset{\sim}{\mathbf{E}}_k^e - \underset{\sim}{\mathbf{E}}_t^* + \sum\limits_s \Delta\gamma_t^s.\{\underset{\sim}{\mathbf{N}}^s.\underset{\sim}{\mathbf{C}}_k^e\} \\ R_k^{\Delta\gamma_k^s} &= \Delta\gamma_k^s - \dot{\gamma}_0 \left(\frac{\left| \underset{\sim}{\mathbf{N}}^s : \underset{\approx}{\mathbf{\Lambda}} : (\underset{\sim}{\mathbf{E}}_t^e + \Delta\underset{\sim}{\mathbf{E}}_k^e) \right|}{\alpha\mu\sqrt{\sum\limits_{p=1}^{N} d^{sp}(r_t^p + \Delta r_k^p)}} \right)^{1/m} \Delta t.sign(\tau^s) \\ R_k^{\Delta r_k^s} &= \Delta r_k^s - \left(\frac{\sqrt{\sum\limits_{p=1}^{N} a^{sp}(r_t^p + \Delta r_k^p)}}{K} - 2\frac{y_c}{b}(r_t^s + \Delta r_k^s) \right) \Delta\gamma_k^s \end{cases}$$

Les composants de la matrice jacobienne

- $R_k^{\Delta\underset{\sim}{\mathbf{E}}_k^e} = \underset{\sim}{\mathbf{E}}_t^e + \Delta\underset{\sim}{\mathbf{E}}_k^e - \underset{\sim}{\mathbf{E}}_t^* + \sum\limits_s \Delta\gamma_k^s.\{\underset{\sim}{\mathbf{N}}^s.\underset{\sim}{\mathbf{C}}_k^e\}$

$$
\begin{array}{lcll}
deel_deel & = & \dfrac{\partial R^{\Delta \underset{\sim}{\mathbf{E}}^e}}{\partial \underset{\sim}{\mathbf{E}}^e} & = \underset{\approx}{\mathbf{I}} + 2\sum_{s=1}^{N}\{\underset{\sim}{\mathbf{N}}^s \underset{\approx}{\mathbf{I}}\}.\Delta\gamma_k^s \\
deel_dgvcum\,[s] & = & \dfrac{\partial R^{\Delta \underset{\sim}{\mathbf{E}}^e}}{\partial \Delta\gamma^s} & = \{\underset{\sim}{\mathbf{N}}^s \underset{\sim}{\mathbf{C}}_k\} \\
deel_dr\,[s] & = & \dfrac{\partial R^{\Delta \underset{\sim}{\mathbf{E}}^e}}{\partial \Delta r^s} & = 0
\end{array}
$$

- $R_k^{\Delta\gamma_k^z} = \Delta\gamma_k^s - \dot{\gamma}_0 \left(\dfrac{\left| \underset{\sim}{\mathbf{N}}^s : \underset{\approx}{\mathbf{\Lambda}} : (\underset{\sim}{\mathbf{E}}_t^e + \Delta\underset{\sim}{\mathbf{E}}_k^e) \right|}{\alpha\mu\sqrt{\sum_{p=1}^{N} d^{sp}(r_t^p + \Delta r_k^p)}} \right)^{1/m} \Delta t.sign(\tau^s)$

$$
\begin{array}{lcll}
dgvcum_deel & = & \dfrac{\partial R_k^{\Delta\gamma}}{\partial \Delta \underset{\sim}{\mathbf{E}}^e} & = -\dot{\gamma}_0.\Delta t.sign(\tau^s).\dfrac{1}{m}\left(\dfrac{\left| \underset{\sim}{\mathbf{N}}^s : \underset{\approx}{\mathbf{\Lambda}} : (\underset{\sim}{\mathbf{E}}_t^e + \Delta\underset{\sim}{\mathbf{E}}_k^e) \right|}{\alpha\mu\sqrt{\sum_{p=1}^{N} d^{sp}(r_t^p + \Delta r_k^p)}} \right)^{\frac{1-m}{m}} \\
 & & & \times \left(\dfrac{\underset{\approx}{\mathbf{\Lambda}} : \underset{\sim}{\mathbf{N}}^s}{\alpha\mu\sqrt{\sum_{p=1}^{N} d^{sp}(r_t^p + \Delta r_k^p)}} \right).sign(\tau^s) \\
dgvcum_dgvcum_{su} & = & \dfrac{\partial R_k^{\Delta\gamma}}{\partial \Delta\gamma} & = \delta_{su} \\
dgvcum_dr_{su} & = & \dfrac{\partial R_k^{\Delta\gamma}}{\partial \Delta r} & = -\dot{\gamma}_0.\Delta t.sign(\tau^s).\dfrac{1}{m}\left(\dfrac{\left| \underset{\sim}{\mathbf{N}}^s : \underset{\approx}{\mathbf{\Lambda}} : (\underset{\sim}{\mathbf{E}}_t^e + \Delta\underset{\sim}{\mathbf{E}}_k^e) \right|}{\alpha\mu\sqrt{\sum_{p=1}^{N} d^{sp}(r_t^p + \Delta r_k^p)}} \right)^{\frac{1-m}{m}} \\
 & & & \times -\dfrac{1}{2}\left(\dfrac{\left| \underset{\sim}{\mathbf{N}}^s : \underset{\approx}{\mathbf{\Lambda}} : (\underset{\sim}{\mathbf{E}}_t^e + \Delta\underset{\sim}{\mathbf{E}}_k^e) \right|}{\alpha\mu\left(\sqrt{\sum_{p=1}^{N} d^{sp}(r_t^p + \Delta r_k^p)}\right)^3} \right) d^{up}
\end{array}
$$

- $R_k^{\Delta r_k^s} = \Delta r_k^s - \left(\dfrac{\sqrt{\sum_{p=1}^{N} a^{sp}(r_t^p + \Delta r_k^p)}}{K} - 2\dfrac{y_c}{b}(r_t^s + \Delta r_k^s) \right) \Delta\gamma_k^s$

$$
\begin{aligned}
dr_deel &= \frac{\partial R_k^{\Delta r_k^s}}{\partial \Delta \underset{\sim}{\mathbf{E}}^e} = 0 \\
dr_dgvcum_{su} &= \frac{\partial R_k^{\Delta r_k^s}}{\partial \Delta \gamma_u} = -\delta_{su} \left(\frac{\sqrt{\sum_{p=1}^{N} a^{sp}(r_t^p + \Delta r_k^p)}}{K} - 2\frac{y_c}{b}(r_t^s + \Delta r_k^s) \right) \\
dr_dr_{su} &= \frac{\partial R_k^{\Delta r_k^s}}{\partial \Delta r_u} = \delta_{su} - \left(\frac{a^{su}}{2K\sqrt{\sum_{p=1}^{N} a^{sp}(r_t^p + \Delta r_k^p)}} - 2\frac{y_c}{b}\delta_{su} \right) \Delta\gamma_k^s
\end{aligned}
$$

Les valeurs à la $k+1$ ième de l'itération :

$$
\begin{pmatrix} \Delta \underset{\sim}{\mathbf{E}}_{k+1}^e \\ \Delta\gamma_{k+1} \\ \Delta r_{k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Delta \underset{\sim}{\mathbf{E}}_{k}^e \\ \Delta\gamma_{k} \\ \Delta r_{k} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \left[\frac{\partial R_k^{\Delta \underset{\sim}{\mathbf{E}}^e}}{\partial \Delta \underset{\sim}{\mathbf{E}}^e}\right] & \left[\frac{\partial R_k^{\Delta \underset{\sim}{\mathbf{E}}^e}}{\partial \Delta \gamma}\right] & \left[\frac{\partial R_k^{\Delta \underset{\sim}{\mathbf{E}}^e}}{\partial \Delta r}\right] \\ \left[\frac{\partial R_k^{\Delta \gamma}}{\partial \Delta \underset{\sim}{\mathbf{E}}^e}\right] & \left[\frac{\partial R_k^{\Delta \gamma}}{\partial \Delta \gamma}\right] & \left[\frac{\partial R_k^{\Delta \gamma}}{\partial \Delta r}\right] \\ \left[\frac{\partial R_k^{\Delta r}}{\partial \Delta \underset{\sim}{\mathbf{E}}^e}\right] & \left[\frac{\partial R_k^{\Delta r}}{\partial \Delta \gamma}\right] & \left[\frac{\partial R_k^{\Delta r}}{\partial \Delta r}\right] \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} R_k^{\Delta \underset{\sim}{\mathbf{E}}^e} \\ R_k^{\Delta \gamma} \\ R_k^{\Delta r} \end{pmatrix}
$$

E.2 Les groupes de paramètres non retenus

ΔG	1.(EV)	p	0.17		$-196°C$	$-90°C$	$-60°C$	$25°C$
τ_R	748(MPa)	q	1.21	K	80.	31.	23.	17.5
τ_0	51.18(MPa)			g_{cb}	15.	30.5	41.	65.

TAB. *E.1. Matériaux non-irradié No.1*

ΔG	1.(EV)	p	0.17		$-196°C$	$-90°C$	$-60°C$	$25°C$
τ_R	498(MPa)	q	1.01	K	80.	31.	23.	17.5
τ_0	51.18(MPa)			g_{cb}	15.	32.	41.	67.

TAB. *E.2. Matériaux non-irradié No.2*

ΔG	0.749(EV)	p	0.35		$-196°C$	$-90°C$	$-60°C$	$25°C$
τ_R	498(MPa)	q	1.21	K	80.	40.	23.	13.
τ_0	40.82(MPa)			g_{cb}	15.	27.	41.	78.

TAB. *E.3. Matériaux non-irradié No.3*

ΔG	0.881(EV)	p	0.25		$-196°C$	$-90°C$	$-60°C$	$25°C$
τ_R	498(MPa)	q	1.08	K	65.	31.	20.	13.5
τ_0	43.21(MPa)			g_{cb}	16.	31.	46.	76.

TAB. *E.4. Matériaux non-irradié No.4*

ΔG	1.(EV)	p	0.25		$-196°C$	$-90°C$	$-60°C$	$25°C$
τ_R	748(MPa)	q	1.5	K	80.	31.	23.	14.5
τ_0	43.61(MPa)			g_{cb}	15.	32.	41.	73.

TAB. *E.5. Matériaux non-irradié No.5*

ΔG	1.(EV)	p	0.25		$-120°C$	$-90°C$	$25°C$
τ_R	498(MPa)	q	1.21	K	66.5.	31.	17.5
τ_0	77.12(MPa)			g_{cb}	16.5	32.	71.5

TAB. *E.6. Matériaux irradié No.1*

ΔG	0.874(EV)	p	0.35		$-120°C$	$-90°C$	$25°C$
τ_R	498(MPa)	q	1.21	K	76.	31.	13.
τ_0	61.18(MPa)			g_{cb}	16.	32.	83.

TAB. *E.7. Matériaux irradié No.2*

ΔG	0.936(EV)	p	0.25		$-120°C$	$-90°C$	$25°C$
τ_R	498(MPa)	q	1.01	K	76.	31.	13.
τ_0	56.52(MPa)			g_{cb}	17.	32.	83.

TAB. *E.8. Matériaux irradié No.3*

ΔG	2.37(EV)	p	0.15		$-120°C$	$-90°C$	$25°C$
τ_R	498(MPa)	q	1.21	K	76.	31.	13.
τ_0	47.24(MPa)			g_{cb}	16.	32.	83.

TAB. *E.9. Matériaux irradié No.4*

ΔG	1.37(EV)	p	0.25		$-120°C$	$-90°C$	$25°C$
τ_R	498(MPa)	q	1.31	K	76.	31.	14.
τ_0	57.92(MPa)			g_{cb}	14.5	31.	79.

TAB. *E.10. Matériaux irradié No.5*

ΔG	1.(EV)	p	0.2		$-120°C$	$-90°C$	$25°C$
τ_R	498(MPa)	q	1.	K	76.	31.	19.
τ_0	77.12(MPa)			g_{cb}	16.	32.	65.

TAB. *E.11. Matériaux irradié No.6*

ΔG	1.(EV)	p	0.35		$-120°C$	$-90°C$	$25°C$
τ_R	498(MPa)	q	1.31	K	76.	31.	12.7
τ_0	55.21(MPa)			g_{cb}	15.7	31.5	81.5

TAB. *E.12. Matériaux irradié No.7*

ΔG	1.186(EV)	p	0.35		$-120°C$	$-90°C$	$25°C$
τ_R	498(MPa)	q	1.31	K	105.	40.	12.
τ_0	40.82(MPa)			g_{cb}	14.	26.5	87.

TAB. *E.13. Matériaux irradié No.8*

ΔG	1.248(EV)	p	0.31		$-120°C$	$-90°C$	$25°C$
τ_R	498(MPa)	q	1.23	K	105.	40.	12.
τ_0	40.82(MPa)			g_{cb}	14.	26.5	87.

TAB. *E.14. Matériaux irradié No.9*

E.3 Conditions limites de déplacements

Coefficient η	Temps	$U_z(z=1,t)$	$U_x(x=1,t)$
	0.00000	0.0000000	0.0000000
0.00	12.0636	0.0060318	0.0000000
0.10	13.9760	0.0069880	-0.0006940
0.20	16.4104	0.0082052	-0.0016277
0.30	19.5921	0.0097961	-0.0029103
0.40	24.0722	0.0120361	-0.0047572
0.50	30.5923	0.0152962	-0.0075329
0.60	40.9193	0.0204597	-0.0120297
0.70	59.2496	0.0296248	-0.0201407
0.75	74.5342	0.0372671	-0.0269461
0.80	98.2368	0.0491184	-0.0374550
0.82	111.8840	0.0559420	-0.0434422
0.84	129.1340	0.0645670	-0.0509468
0.86	151.2960	0.0756480	-0.0604819
0.88	181.7090	0.0908545	-0.0732930
0.90	225.2740	0.1126370	-0.0911108

TAB. *E.15. Matériaux non-irradié,* $25°C$

Coefficient η	Temps	$U_z(z=1,t)$	$U_x(x=1,t)$
	0.00000	0.0000000	0.0000000
0.00	14.1034	0.0070517	0.0000000
0.10	16.2438	0.0081219	-0.0008056
0.20	19.0593	0.0095297	-0.0018879
0.30	22.7145	0.0113573	-0.0033689
0.40	27.7692	0.0138846	-0.0054778
0.50	35.2113	0.0176057	-0.0086505
0.60	46.8355	0.0234178	-0.0137291
0.70	67.3294	0.0336647	-0.0227978
0.75	84.0924	0.0420462	-0.0302622
0.80	110.1310	0.0550655	-0.0417532
0.82	125.1980	0.0625990	-0.0483072
0.84	143.8160	0.0719080	-0.0563507
0.86	168.1860	0.0840930	-0.0667101
0.88	201.5540	0.1007770	-0.0805647
0.90	248.9520	0.1244760	-0.0996272

TAB. *E.16. Matériaux irradié,* $25°C$

Coefficient η	Temps	$U_z(z=1,t)$	$U_x(x=1,t)$
	0.00000	0.0000000	0.0000000
0.00	14.4432	0.0072216	0.0000000
0.10	16.5810	0.0082905	-0.0008222
0.20	19.2321	0.0096161	-0.0019049
0.30	22.6998	0.0113499	-0.0033668
0.40	27.4738	0.0137369	-0.0054203
0.50	34.4848	0.0172424	-0.0084751
0.60	45.6079	0.0228040	-0.0133773
0.70	65.7088	0.0328544	-0.0222665
0.75	82.8816	0.0414408	-0.0298438
0.80	109.7160	0.0548580	-0.0416041
0.82	125.3990	0.0626995	-0.0483802
0.84	144.9910	0.0724955	-0.0567799
0.86	171.3920	0.0856960	-0.0678814
0.88	207.2110	0.1036055	-0.0826136
0.90	258.2870	0.1291435	-0.1029357
0.91	293.2180	0.1466090	-0.1163554
0.92	337.7320	0.1688660	-0.1329123
0.93	396.0860	0.1980430	-0.1537340

TAB. *E.17. Matériaux non-irradié,* $-90°C$

Coefficient η	Temps	$U_z(z=1,t)$	$U_x(x=1,t)$
	0.00000	0.0000000	0.0000000
0.00	17.7135	0.0088568	0.0000000
0.10	20.3395	0.0101698	-0.0010067
0.20	23.5662	0.0117831	-0.0023292
0.30	27.7054	0.0138527	-0.0040990
0.40	33.4691	0.0167346	-0.0065836
0.50	41.8253	0.0209127	-0.0102421
0.60	55.0136	0.0275068	-0.0160623
0.70	78.3446	0.0391723	-0.0263870
0.75	98.0155	0.0490078	-0.0350386
0.80	128.7780	0.0643890	-0.0483951
0.82	146.3460	0.0731730	-0.0559107
0.84	168.8920	0.0844460	-0.0654109
0.86	198.1490	0.0990745	-0.0775235
0.88	238.1040	0.1190520	-0.0936201

TAB. *E.18. Matériaux irradié,* $-90°C$

Coefficient η	Temps	$U_z(z=1,t)$	$U_x(x=1,t)$
	0.00000	0.0000000	0.0000000
0.00	13.1154	0.0065577	0.0000000
0.10	15.1460	0.0075730	-0.0007516
0.20	17.6695	0.0088348	-0.0017515
0.30	20.9817	0.0104909	-0.0031146
0.40	25.5753	0.0127877	-0.0050505
0.50	32.4164	0.0162082	-0.0079748
0.60	43.1809	0.0215905	-0.0126805
0.70	62.9350	0.0314675	-0.0213553
0.75	79.5712	0.0397856	-0.0286975
0.80	105.8370	0.0529185	-0.0402071
0.82	121.0810	0.0605405	-0.0468093
0.84	140.1390	0.0700695	-0.0550043
0.86	165.4090	0.0827045	-0.0656928
0.88	200.1510	0.1000755	-0.0800549
0.90	249.7190	0.1248595	-0.0999001

TAB. *E.19. Matériaux non-irradié,* $-60°C$

Coefficient η	Temps	$U_z(z=1,t)$	$U_x(x=1,t)$
	0.00000	0.0000000	0.0000000
0.00	19.9358	0.0099679	0.0000000
0.10	22.7649	0.0113825	-0.0011254
0.20	26.2797	0.0131399	-0.0025939
0.30	30.8083	0.0154042	-0.0045511
0.40	36.0176	0.0180088	-0.0070761
0.50	45.9680	0.0229840	-0.0112338
0.60	60.0000	0.0300000	-0.0174757
0.70	84.8371	0.0424186	-0.0284847
0.75	105.5990	0.0527995	-0.0376136
0.80	138.3940	0.0691970	-0.0517749
0.82	157.2180	0.0786090	-0.0597616
0.84	181.3380	0.0906690	-0.0698305
0.86	212.5530	0.1062765	-0.0826175
0.88	255.0000	0.1275000	-0.0995122

TAB. *E.20. Matériaux irradié,* $-120°C$

Coefficient η	Temps	$U_z(z=1,t)$	$U_x(x=1,t)$
	0.00000	0.0000000	0.0000000
0.00	25.0216	0.0125108	0.0000000
0.10	28.4592	0.0142296	-0.0014030
0.20	32.8099	0.0164050	-0.0032280
0.30	38.3960	0.0191980	-0.0056509
0.40	46.1037	0.0230519	-0.0090130
0.50	57.1684	0.0285842	-0.0138949
0.60	74.4370	0.0372185	-0.0215298
0.70	104.7290	0.0523645	-0.0348312
0.75	130.1360	0.0650680	-0.0458196
0.80	169.8310	0.0849155	-0.0626154
0.82	192.2050	0.0961025	-0.0718948
0.84	221.0560	0.1105280	-0.0836030
0.86	258.4650	0.1292325	-0.0984208

TAB. *E.21. Matériaux non-irradié,* $-196°C$

E.4 Tables

$E(MPa)$	ν	$\dot{\gamma}_0$	m	α	$\mu(MPa)$	K	ycs	r_i
110000	0.3	$1.e-10$	0.07	0.3	42000	38	3.36	$2.56e-6$

TAB. *E.22. Paramètres des modèles Tabourot*

$h0$	$h1$	$h2$	$h3$	$h4$	$h5$
0.2	0.2	0.3	0.3	0.4	0.4

TAB. *E.23. Paramètres des modèles Tabourot*

$C_{1111}(MPa)$	$C_{1122}(MPa)$	$C_{1212}(MPa)$	F_0	gv_0	p
168570	121500	75561	$2.5e-19$	$1.e+6$	0.2
q	$\rho_i^e b^2$	$\rho_i^s b^2$	$\tau_{c0}(MPa)$	C_e	
1.2	8000	8000	20.0	1.0	
$T(°K)$	w_1	w_2	λ	$\mu(MPa)$	$\mu_0(MPa)$
295	1.5	1.2	0.3	45000	49000
C_s	K_e	K_s	d_e	d_s	b_s
1.0	$14.1e-3$	$28.2e-3$	$1.0e-6$	$5.0e-6$	$0.257e-6$

TAB. *E.24. Paramètres pour modèles utilisés dans la thèse de G.Abrivard*

	Weght%						ppm							
	C	Si	Mn	Ni	Cr	Mo	S	Co	As	Al	N	P	Cu	Sn
A	0,176	0,250	1,330	0,700	0,190	0,510	140	200	98	150	37	200	1020	160
B	0,171	0,250	1,320	0,690	0,180	0,500	130	300	89	210	41	90	980	160
C	0,180	0,250	1,290	0,700	0,190	0,500	130	300	94	170	30	90	200	170
D	0,171	0,260	1,310	0,690	0,190	0,510	140	200	98	130	33	90	200	50

TAB. *E.25. Compositions chimiques des différents types d'aciers 16 MND5 [CEA,].*

E.4.1 Les données pour l'essai de traction du mono cristal

Temps (s)	$\sigma 11(MPa)$	$\sigma 22(MPa)$	$U3$	$\sigma 12(MPa)$	$\sigma 23(MPa)$	$\sigma 31(MPa)$
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
500.0	0.0	0.0	5.	0.0	0.0	0.0

TAB. *E.26. Conditions de la teste (modèles Kocks-Rauch et Tabourot)*

x3	-1.	2.	5.
x1	-19.	10.	1.

TAB. *E.27. Rotation crystalo des matériaux (modèles Kocks-Rauch et Tabourot)*

$E(MPa)$	ν	$\dot{\gamma}_0$	m	α	$\mu(MPa)$	K	ycs	r_i
110000	0.3	$1.e-10$	0.05	0.3	42000	38	3.36	$0.546e-10$

TAB. *E.28. Paramètres des modèles Tabourot*

$h0$	$h1$	$h2$	$h3$	$h4$	$h5$
0.2	0.2	0.3	0.3	0.4	0.4

TAB. *E.29. Paramètres des modèles Tabourot*

$C11(GPa)$	$C12(GPa)$	$C44(GPa)$	$\dot{\gamma}_0$	$\tau_0(MPa)$	$T(°K)$	$b(m)$	a_{su}
275.2	112.4	81.4	$1.E+6\,s^{-1}$	132	298	$2.514E-10$	0.25
K	$g_c(m)$	$r_i(m)$	$d(m)$	$\Delta G_0(eV)$	$\tau_R(MPa)$	p	q
22.9	$8.E-8$	$0.546e-10$	$10.E-6$	0.77	498.	0.335	1.12

TAB. *E.30. Paramètres des modèles Kocks-Rauch*

Temps (s)	$\sigma11(MPa)$	$\sigma22(MPa)$	$U3$	$\sigma12(MPa)$	$\sigma23(MPa)$	$\sigma31(MPa)$
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
200.0	0.0	0.0	0.14	0.0	0.0	0.0

TAB. *E.31. Conditions de la teste (modèles Mandel)*

x3	2.	3.	8.
x1	-19.	10.	1.

TAB. *E.32. Rotation crystalo des matériaux (modèles Mandel)*

n	K	R0	Q	b	$h1$	$h2$	$h3$	$h4$	$h5$	$h6$
10.	10.	50.	100.	500	1.	1.	1.	1.	1.	1.

TAB. *E.33. Paramètres des modèles Mandel*

Bibliographie

[cea,] Rohdaten p147gw traverse ngtm 1.

[Abrivard, 2007] Abrivard, G. (2007). *Approche multiéchelle pour la prédiction de la recristallisation des alliages métalliques à partir d'une approche micro-mécanique*. PhD thesis, Ecole des Mines de Paris.

[Bacon and Osetsky, 2004] Bacon, D. and Osetsky, Y. (2004). Hardening due to copper precipitates in a-iron studied by atomic-scale modelling. *J. Nucl. Mat.*, pages 1233–1237.

[Bacon and Osetsky, 2005] Bacon, D. and Osetsky, Y. (2005). Modelling dislocation-obstacle interactions in metals exposed to an irradiation environment. *Materials Science and Engineering*, 400 :353–361.

[Bacon and Osetsky, 2007] Bacon, D. and Osetsky, Y. (2007). The atomic-scale modeling of dislocation-obstacle interactions in irradiated metals. *Journal of Nuclear Materials*, pages 329–333.

[Bacon et al., 2006] Bacon, D., Osetsky, Y., and Rong, Z. (2006). *Philosophical Magazine*, 86 :3921.

[Barbe et al., 2001a] Barbe, F., Decker, L., Jeulin, D., and Cailletaud, G. (2001a). Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates. Part 1 : F.E. model. *Int. J. of Plasticity*, 17 :513–536.

[Barbe et al., 2001b] Barbe, F., Forest, S., and Cailletaud, G. (2001b). Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates. *International Journal of Plasticity*, 17 :537–563.

[Barbe et al., 2001c] Barbe, F., Forest, S., and Cailletaud, G. (2001c). Polycrystalline plasticity under small strains. Toward finer descriptions of microstructures. In E. Bouchaud et al, editor, *NATO Proceedings, Physical Aspects of Fracture*, pages 191–206. Kluwer Academic Publishers.

[Barbe et al., 2008] Barbe, F., Quey, R., Taleb, L., and de Cursi, E. S. (2008). Numerical modelling of the plasticity induced during diffusive transformation. an ensemble averaging approach for the case of random arrays of nuclei. *European journal of mechanics*, 27 :1121–1139.

[Barbe et al., 2003] Barbe, F., Quilici, S., Forest, S., and Cailletaud, G. (2003). Numerical study of crystalline plasticity : measurements of the heterogeneities due to grain boundaries under small strains. *La Revue de Métallurgie-CIT/Science et Génie des Matériaux*, september 2003 :815–823.

[Beremin, 1983] Beremin, F. (1983). A local criterion for cleavage fracture of a nuclear pressure vessel steel. *Metallurgical Transactions*, 14A :2277–2286.

[Besson and Foerch, 1998] Besson, J. and Foerch, R. (1998). Object–oriented programming applied to the finite element method. Part I : General concepts. *Revue Européenne des Éléments Finis*, 7(5) :535–566.

[Besson et al., 1998] Besson, J., Le Riche, R., Foerch, R., and Cailletaud, G. (1998). Object–oriented programming applied to the finite element method. Part II : Application to material behaviors. *Revue Européenne des Éléments Finis*, 7(5) :567–588.

[Bhadeshia and Edmonds, 1979] Bhadeshia, H. and Edmonds, D. (1979). The bainite transformation in a silicon steel. *Melallurgical Transactions*, 10A :895–907.

[Bullough and Newman, 1962] Bullough, R. and Newman, R. (1962). Comments on a paper by mura et al. entitled : Segregation of solute atoms during strain aging. *Acta Metall.*, 10 :1971–1973.

[Cailletaud, 1992] Cailletaud, G. (1992). A micromechanical approach to inelastic bahaviour of metals. *International journal of plasticity*, 8 :55–73.

[Cailletaud et al., 2003] Cailletaud, G., Forest, S., Jeulin, D., Feyel, F., Galliet, I., Mounoury, V., and Quilici, S. (2003). Some elements of microstructural mechanics. *Computational Materials Science*, 27 :351–374.

[Campbell and Ferguson, 1970] Campbell, J. and Ferguson, W. (1970). The temperature and strain rate dependence of the shear strength of mild steel. *Phil.Mag*, 81 :63–82.

[Carassou, 1999] Carassou, S. (1999). *Déclenchement du clivage dans un acier faiblement allié : Rôle de l'endommagement ductile localisé autour des inclusions*. PhD thesis, Ecole des Mines de Paris.

[Carter et al., 2001] Carter, R., Soneda, N., Dohi, K., Hyde, J., English, C., and Server, W. (2001). Microstructural charcterization of irradiation cu-rich clusters. *Journal of Nuclear Materials*, 298 :211–224.

[CEA,] CEA. Rapport interne de cea.

[Chan, 2007] Chan, D. (2007). http ://deuns.chez.com/sciences/matiere/disloc2.html.

[Chen et al., 1996] Chen, J., Wang, G., and Wang, H. (1996). A statistical model for cleavage fracture of low alloy steel. *Acta Mater*, 44 :pp3979–3989.

[Christian, 1983] Christian, J. (1983). Some surprising features of plastic deformation of body-centered cubic metals and alloy. *Metall. Trans.*, 14A :1238–1256.

[Conrad, 1964] Conrad, H. (1964). Thermally activated deformation of metals. *J. Metals*, July :582–588.

[Cordier et al., 2005] Cordier, P., Barbe, F., Durinck, J., Tommasi, A., and Walker, A. (2005). *Plastic Deformation of mantle minerals : Multiscale numerical modelling*, volume 7, chapter 16, pages 389–415. EMU Notes in Mineralogy, R. Miletich (ed.), Eötvös University Press. 7th EMU School of Mineralogy : Mineral behaviour at extreme conditions, Heidelberg, Germany, June 2005.

[Cotrell, 1958] Cotrell, A. (1958). Theory of brittle fracture in steel and similar metals. *Trans. of the Met. Soc. of AIME,*, 212 :192–203.

[Coulomb and Friedel, 1956] Coulomb, P. and Friedel, J. (1956). Dislocations and mechanical properties of crystals. *Lake Placid Conference*, page 555.

[Diard et al., 2005a] Diard, O., Leclercq, S., and Cailletaud, G. (2005a). Evaluation of finite element based analysis of 3d multicrystalline aggregates plasticity. *International Journal of Plasticity*, 21 :691–722.

[Diard et al., 2005b] Diard, O., Leclercq, S., Rousselier, G., and Cailletaud, G. (2005b). Evaluation of finite element based analysis of 3D multicrystalline aggregates plasticity. Application to crystal plasticity model identification and the study of stress and strain fields near grain boundaries. *Int. J. of Plasticity*, 21 :691–722.

[Diard and Vincent, 2006] Diard, O. and Vincent, L. (2006). Harmonisation of crystal plasticity laws and review of avaiable meshes for the toughness module. Technical report, CEA-EDF.

[EDF, 2001] EDF (2001). Industry nuclear generation division corporate laboratories, private communication.

[Essmann and Mughrabi, 1979] Essmann, U. and Mughrabi, H. (1979). Annihilation of dislocations during tensile and cyclic deformation and limits of dislocation densities. *Phil.Mag*, A40, No.6 :731–756.

[Franciosi, 1984] Franciosi, P. (1984). *Etude théorique et exprimentale du comportement élastoplastique des monocristaux métalliques se déformant par glissement : Modélisation pour un chargement complexe quasi-statique*. PhD thesis, Université de Paris-Nord, France.

[François et al., 1995] François, D., Pineau, A., and Zaoui, A. (1995). *Comportement mécanique des matériaux : Viscoplasticité, endommagement, mécanique de la rupture, mécanique du contact*. Hermes.

[Friedel, 1969] Friedel, J. (1969). Electronic structure of the d-band. its role in the cristalline and magnetic structures. *Pergamon*.

[Gmsh 1.60, 2005] Gmsh 1.60 (2005). *User Manual*. http ://www.geuz.org/gmsh.

[Gourgues et al., 2000] Gourgues, A., Flower, H., and Lindley, T. (2000). Electron backscattering diffraction study of acicular ferrite, bainite, and martensite steel microstructures. *Mater. Sci. Technol*, 16 :26–40.

[Groh and Conte, 1971] Groh, P. and Conte, R. (1971). Stress relaxation and creep in alpha-iron filamentary single crystals at low temperature. *Acta metallurgica*, 19 :895–902.

[Harding, 1977] Harding, J. (1977). Effect of temperature and strain-rate on strength and ductility of poor alloy steels. *Met. Technology*, January :6–16.

[Harry and Bacon, 2002] Harry, T. and Bacon, D. (2002). Computer simulation of the core structure of the ¡111¿ screw dislocation in alpha-iron containing copper precipitates : Dislocation-precipitate interaction and the strengthening effect. *Acta Materialia*, 50 :209–222.

[Hausild, 2002] Hausild, P. (2002). *Transition ductile-fragile dans un acier faiblement allié*. PhD thesis, Ecole Centrale de Paris.

[Hirsch, 1976] Hirsch, P. (1976). Point defect cluster hardening. *In R.E Smallman et J.E. Harris, editors*, page 95.

[Hirth and Lothe, 1982] Hirth, J. and Lothe, J. (1982). *Theory of Dislocation*.

[H.Mecking, 1987] H.Mecking, Y. (1987). Proc. int. symp. metallurgy and materials science, riso, denmark. page 123.

[J.Mandel, 1972] J.Mandel (1972). Plasticité classique et viscoplasticité. *Springer Verlag*, 97.

[Kalidindi, 2001] Kalidindi, S. (2001). Modeling anisotropic strain hardening and deformation textures in low stracking fault energy fcc metal. *International Journal of Plasticity*, 17 :837–860.

[Kalidindi and Anand, 1994] Kalidindi, S. and Anand, L. (1994). Marcoscopic shape change and evolution of crystallographic tecture in pre-textured fcc metals. *Mechanics and Physics of Solids*, 42 :459–490.

[Karlik et al., 2003] Karlik, M., Nedbal, I., and Siegl, J. (2003). Microstructure of a reactor pressure vessel close to the zones of ductile tearing and cleavage. *Mat. Sci. and Eng. A*, 357 :423–428.

[Keh, 1965] Keh, A. (1965). Work-hardening and deformation sub-structure in iron single crystals deformed in tension at 298°c. *Phil. Mag*, 12 :9–30.

[Keh, 1967] Keh, A. (1967). Plasticity of iron single crystals. *Can.J.Phys*, 45 :1101–1120.

[Kelly, 1992] Kelly, P. (1992). Crystallography of lath martensite in steels. *Acta Metall*, 40 :1519–1530.

[Kimura and Maddin, 1965] Kimura, H. and Maddin, R. (1965). Effect of quenched-in vacancies on the mechanical properties of metals and alloys. *Academic Press*, page 319.

[Kirk et al., 2001] Kirk, M., Natishan, M., and Wagenhofer, M. (2001). Astm-stp-1406.

[Kocks et al., 1975] Kocks, U., Argon, A., and Ashby, M. (1975). *Thermodynamics and kinetics of slip - Progress in Materials Science*. Pergamon Press Oxford.

[Kroon and Faleskog, 2005] Kroon, M. and Faleskog, J. (2005). Micromechanics of cleavage fracture initiation in ferritic steels by carbide cracking. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 53 :171 196.

[Kroupa, 1962] Kroupa, F. (1962). *Philosophical Magazine*, 7 :783.

[Kroupa, 1966] Kroupa, F. (1966). The force between a dislocation dipole and a non-parallel dislocation. *Acta Metallurgica*, 14 :60–61.

[Lambert-Perlade, 2001] Lambert-Perlade, A. (2001). *Rupture par clivage de microstructures d'aciers bainitiques obtenues en conditions de soudage*. PhD thesis, Ecole des Mines de Paris.

[Lan et al., 1992] Lan, Y., Klaar, H., and Dahl, W. (1992). Evolution of dislocation substructure and deformation behavior of iron at different temperature. *Metall. Trans*, 23A :537–544.

[Lebensohn et al., 2009] Lebensohn, R., Montagnat, M., Mansuy, P., Duval, P., Meysonnier, J., and Philip, A. (2009). Modeling viscoplastic behavior and heterogeneous intracrystalline deformation of columnar ice polycrystals. *Acta Materiala*, 57 :1405–1415.

[Lee et al., 2002] Lee, S., Kim, S., Hwang, B., Lee, B., and Lee, G. (2002). Effect of carbide distribution on the fracture toughness in the transition temperature region of an sa 508 steel. *Acta Mater*, 50 :4755–4762.

[Li, 1995] Li, X. (1995). *Etude des Processus de Formation des Microcavités dans les Alliages Ferritiques des Cuves des Réacteurs Nucléaires*. PhD thesis, Université Joseph Fourrier-Grenoble.

[Libert, 2007a] Libert, M. (2007a). *Etudes expérimentale et numérique de l'effet des mécanismes de plasticité sur la rupture fragile par clivage dans les aciers faiblement alliés*. PhD thesis, Ecole Centrale Paris.

[Libert, 2007b] Libert, M. (2007b). *Etudes expérimentale et numérique de l'effet des mécanismes de plasticité sur la rupture fragile par clivage dans les aciers faiblement alliés*. PhD thesis, Ecole Centrale Paris.

[Louchet et al., 1979] Louchet, F., Kubin, L., and Vesely, D. (1979). In situ deformation of b.c.c crystals at low temperatures in a high-voltage electron microscope-dislocation mechanisms and strain-rate equation. *Phil.Mag*, A39. No4 :433–454.

[Ma, 1998] Ma, H. (1998). The effet of stress triaxility on the local cleavage stress in a granular bainitic weld metal. *Int.J.Frac*, 89 :143–157.

[Machova and Beltz, 2004] Machova, A. and Beltz, G. (2004). Ductile-brittle behavior of (001) [110] nano-cracks in bcc iron. *Acta Mater*, 52 :4317–4328.

[Mandel, 1994] Mandel, J. (1994). *Cours de mécanique des miieux continus-Tomes I et II*. Gauthier-Villars.

[Margolin et al., 1999] Margolin, B., Gulenko, A., and Shvetsova, V. (1999). Radiation embrittlement modelling for reactor pressure steels : I brittle fracture toughness prediction. *The International Journal of Pressure Vessels and Piping*, 76 :715–729.

[Margolin et al., 1997a] Margolin, B., Shvetsova, V., and Karzov, G. (1997a). Brittle fracture of nuclear pressure vessel steel i. local criterion for cleavage fracture. *International Journal of Pressure Vessels and Piping*, 72 :73–87.

[Margolin et al., 1997b] Margolin, B., Shvetsova, V., and Karzov, G. (1997b). Brittle fracture of nuclear pressure vessel steel ii. prediction of fracture toughness. *International Journal of Pressure Vessels and Piping*, 72 :89–96.

[Marian et al., 2002] Marian, J., Wirth, B., and Perlado, J. (2002). Mechanism of formation and growth of ¡100¿ interstitial loops in ferritic materials. *Physical review letter*, 88.

[Marini, 2006] Marini, B. (2006). Fragilisation par irradiation des aciers faiblement alliés pour cuves de rep.

[Mathieu, 2006a] Mathieu, J.-P. (2006a). *Analyse et modélisation micromécanique du comportement et de la rupture fragile de l'acier 16MND5 : prise en compte des hétérogénéités microstructurales*. PhD thesis, ENSAM Metz.

[Mathieu, 2006b] Mathieu, J. P. (2006b). *Analyse et modélisation micromécanique du comportement et de la rupture fragile de l'acier 16MND5 : Prise en compte des hétérogénéités microstructurales*. PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers.

[Mecking and Kocks, 1981] Mecking, H. and Kocks, U. (1981). Kinetics of flow and strain-hardening. *Acta Matallurgica*, 29 :1865–1975.

[Morris et al., 2003] Morris, J., Lee, C., and Guo, Z. (2003). The nature and consequences of coherent transformations in steel. *ISIJ Int*, 43 :410–419.

[Mudry, 1982] Mudry, F. (1982). *Etude de la rupture ductile et de la rupture par clivage d'aciers faiblement alliés*. PhD thesis, Université de Technologie de Compiègne.

[Musienko, 2005] Musienko, A. (2005). *Plasticité cristalline en présence de grandes déformations et d'endommagement*. PhD thesis, Ecole des Mines de Paris.

[Musienko and Cailletaud, 2009] Musienko, A. and Cailletaud, G. (2009). Simulation of inter- and transgranular crack propagation in polycrystalline aggregates due to stress corrosion cracking. *Acta Materiala*, 57 :3840–3855.

[Neper, 2009] Neper (2009). *Neper : a software to generate 3D random polycrystals for the finite element method (version 1.8)*. http ://neper.sourceforge.net.

[Nygards and Gudmundson, 2002] Nygards, M. and Gudmundson, P. (2002). Three-dimensional periodic Voronoi grain models and micromechanical FE-simulations of a two-phase steel. *Computational Materials Science*, 24 :513–519.

[Obrtlik et al., 2006] Obrtlik, K., Robertson, C., and Marini, B. (2006). Dislocation structures in 16mnd5 pressure vessel steel strained in uniaxial tension. *J. of Nucl. Mat*, 342 :35–41.

[Odette and Wirth, 1997] Odette, G. and Wirth, B. (1997). A computational microscopy study of nanostructural evolution in irradiated pressure vessel steels. *Journal of Nuclear Materials*, 251 :157–171.

[Ortner et al., 2005] Ortner, S., Duff, J., and Beardsmore, D. (2005). Characterisation of euro a reference steel for application of eoh model of brittle fracture. Technical report, SA/EIG/15234/R003-Project PERFECT.SERCO Assurance.

[Osetsky et al., 2000] Osetsky, Y., Bacon, D., Serra, A., Singh, B., and Golubov, S. I. (2000). Stability and mobility of defect clusters and dislocation loops in metals. *Journal of Nuclear Materials*, 276 :65–77.

[Osipov, 2007] Osipov, N. (2007). *Génération et calcul de microstructures bainitiques, approche locale intragranulaire de la rupture*. PhD thesis, École Nationale Supérieure des Mines de Paris.

[Osipov et al., 2008a] Osipov, N., Gourgues-Lorenzon, A., Marini, B., Mounoury, V., Nguyen, F., and Cailletaud, G. (2008a). Fe modelling of bainitic steels using crystal plasticity. *Philosophical Magazine*, 88 :3757–3777.

[Osipov et al., 2008b] Osipov, N., Gourgues-Lorenzon, A., Marini, B., Mounoury, V., Nguyen, F., and Cailletaud, G. (2008b). FE modelling of bainitic steels using crystal plasticity. *Philosophical Magasine*, 88(30) :3757–3777.

[Pareige, 1994] Pareige, P. (1994). *Etude à la Sonde Atomique de l'Evolution Microstructurale sous Irradiation l'Alliages Ferritiques Fe-Cu et d'Aciers de Cuve de Réacteurs Nucléaires*. PhD thesis, Université de Rouen.

[Peirce et al., 1983] Peirce, D., Asaro, R., and Needleman, A. (1983). Material rate dependence and localized deformation in crystalline solids. *Acta Metallurgica*, 31 :1951–1976.

[Pesci, 2004] Pesci, R. (2004). *Etude micromécanique et caractérisation expérimentale du comportement et de l'endomagement de l'acier de cuve 16MND5 à bases températures.* PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers - CER Metz.

[Quey and Barbe, 2007] Quey, R. and Barbe, F. (2007). Free meshing of microstructures based on modified Voronoi tessellations. In *17th Int Workshop Computational Mechanics of Materials*, Paris (France), August 22-24.

[Radiguet, 2006] Radiguet (2006). Mémoire de thèse. *Université de Rouen.*

[Rauch, 1993] Rauch, E. (1993). *Etude l'écrouissage des métaux : aspects microstructuraux et lois de comportement*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Grenoble.

[Renevey, 1998] Renevey, S. (1998). *Approches globale et locale de la rupture dans le domaine de transition fragile-ductile d'un acier faiblement allié.* PhD thesis, Université Paris XI Orsay-CEA.

[Rhee et al., 1998] Rhee, M., Zbib, H., Hirth, J., Huang, H., and de la Rubia, T. (1998). Models for long-/short-range interactions and cross slip in 3d dislocation simulation of bcc single crystals. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 6 :467.

[Rice and Tracey, 1969] Rice, J. and Tracey, D. (1969). On the ductile enlargement of voids in triaxial stress fields. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 17 :201– 217.

[Ritchie et al., 1973] Ritchie, R., Knott, J., and Rice, J. (1973). On the relationship between critical tensile stress ad fracture toughness in mild steel. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 21 :395–410.

[Rosenfield and Hahn, 1966] Rosenfield, A. and Hahn, G. (1966). Numerical description of the ambiant low temperature and high strain rate and fracture behaviour of plain carbon steel. *Trans. Am. Soc. Metals*, 56 :967.

[Seeger, 1958] Seeger, A. (1958). On the theory of radiation damage and radiation hardening. *Proc. of the 2nd United Nations International Conference on the Peaceful Uses of Atomic Energy*, 6 :250.

[Smith, 1966] Smith, E. (1966). The nucleation and growth of cleavage microcracks in mild steel. *In Physical basis of Yield and Fracture. Conf. Proceedings Inst. Phys. and Phys. Soc., London.*

[Stainier et al., 2002] Stainier, L., Cuitino, A., and Ortiz, M. (2002). A micromechanical model of hardening, rate sensitivity and thermal softening in bcc single srystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 50 :1511–1545.

[Tabourot, 1992] Tabourot, L. (1992). *Loi de comportement élastoviscoplastique du monocristal en grandes transformations.* PhD thesis, Institut National Pomytechnique Grenoble, France.

[Takahashi, 2004] Takahashi, M. (2004). Recent progress : kinetics of the bainite transformation in steels. *Current Opinion in Solid State and Materials Science*, 8 :213–217.

[Tanguy, 2001] Tanguy, B. (2001). *Modélisation de l'essai Charpy par l'approche locale de la rupture. Application au cas de l'acier 16MND5 dans la domaine de transition.* PhD thesis, Ecole des Mines de Paris.

[Tanguy et al., 2005a] Tanguy, B., Bouchet, C., Besson, J., and Bugat, S. (2005a). Prediction of the effects of neutron irradiation on the charpy ductile to brittle transition curve of an a508 pressure vessel steel. *Computational Materials Sciences*, 23 :294–300.

[Tanguy et al., 2005b] Tanguy, B., Bouchet, C., Bugat, S., and Besson, J. (2005b). Local approach to fracture based prediction of the delta t at 56j and delta t at kic equal 100 shifts due to irradiation for an a508 pressure vessel steel. *Engineering Fracture Mechanics*, 73 :191–206.

[Ullmaier and Shilling, 1980] Ullmaier, H. and Shilling, W. (1980). Radiation damage in metallic reactor materials. *Physics of Modern Materials*, 1.

[Wallin et al., 1984] Wallin, K., Saario, T., and et K. Torronen (1984). Statistical model for carbide induced brittle fracture in steel. *Metal Science*, 18 :13–16.

[Ward and Fisher, 1989] Ward, A. E. and Fisher, S. (1989). Dislocation loop growth in pure iron under electron irradiation. *Journal of Nuclear Materials*, 166 :227–234.

[Wirth et al., 2000] Wirth, B., Odette, G., Maroudas, D., and Lucas, G. (2000). Dislocation loop structure, energy and mobility of self-interstitial atom clusters in bcc iron. *Journal of Nuclear Materials*, 276 :33–40.

[Yang et al., 2003] Yang, W., Lee, B., Huh, M., and Hong, J. (2003). Application of the local fracture stress model on the cleavage fracture of the reactor pressure vessel steels in the transition temperature region. *Journal of Nuclear Materials*, 317 :234 242.

[Yang et al., 2004] Yang, W., Lee, B., Huh, M., Wang, G., and Liu, Y. (2004). Microstructural parameters governing cleavage fracture behavior in the ductile/ brittle transition in reactor pressure vessel steel. *Materials Science and Engineering : A*, 379 :17–26.

[Zeghadi et al., 2007] Zeghadi, A., Forest, S., Gourgues, A., and Bouaziz, O. (2007). Ensemble averaging stress-strain fields in polycrystalline aggregates with a constrained surface microstructure - Part 2 : crystal plasticity. *Philosophical Magasine*, 87 :1425–1446.

[Zhao and Tryon, 2004] Zhao, Y. and Tryon, R. (2004). Automatic 3-D simulation and micro-stress distribution of polycrystalline metallic materials. *Comp. Meth. Appl. Mech. Engng*, 193 :3919–3934.

ParisTech
INSTITUT DES SCIENCES ET TECHNOLOGIES
PARIS INSTITUTE OF TECHNOLOGY

MINES ParisTech

Ecole doctorale n°SMI : Sciences des Métiers de l' In génieur

Doctorat ParisTech

T H È S E

pour obtenir le grade de docteur délivré par

l'École nationale supérieure des mines de Paris

Spécialité "Sciences et génie des matériaux"

présentée et soutenue publiquement par

Can Ngon NGUYEN

le 04 février 2010

Modélisation du comportement en plasticité et à rupture des aciers bainitiques irradiés

Volume 2: Résultats en détails

Directeur de thèse : **Georges CAILLETAUD**
Co-encadrement de la thèse : **Fabrice BARBE**

Jury

Mme. Clotilde BERDIN-MERIC	Professeur	Université Paris XI	Rapporteur
M. Ivan GUILLOT	Professeur	Université Paris XII	Rapporteur
M. Philippe BOMPARD	Professeur	École Centrale Paris	Examinateur
M. Fabrice BARBE	Maître de Conférence	INSA de Rouen	Examinateur
M. Bernard MARINI	Ingénieur de Recherche	CEA	Examinateur
M. Charles PETRY	Ingénieur de Recherche	EDF	Examinateur
M. Georges CAILLETAUD	Professeur	MINES PARISTECH	Directeur de thèse

MINES ParisTech
Centre des Matériaux
BP 87, F-91003 Evry cedex, FRANCE

T H E S E

Table des matières

A Résultats des calculs **3**

A.1 Résultats des matériaux non irradiés 4

A.1.1 Matériaux non irradié à température 25°C 4

A.1.2 Matériaux non irradié à température −60°C 18

A.1.3 Matériaux non irradié à température −90°C 32

A.1.4 Matériaux non irradié à température −196°C 46

A.2 Résultats des matériaux irradiés 60

A.2.1 Matériaux irradié à température 25°C 60

A.2.2 Matériaux irradié à température −90°C 74

A.2.3 Matériaux non irradié à température −120°C 88

A.3 Comparaison des matériaux irradié et non irradié 102

A.3.1 Matériaux irradié et non irradié à température 25°C 102

A.3.2 Matériaux irradié et non irradié à température −90°C aux déformations équivalentes 2.5%, 5.0%, 7.5% et 10.0% 116

A.3.3 Matériaux irradié et non irradié à température −90°C à la contrainte principale moyenne 2200 (MPa) 130

Annexe A

Résultats des calculs

A.1 Résultats des matériaux non irradiés

A.1.1 Matériaux non irradié à température 25°C

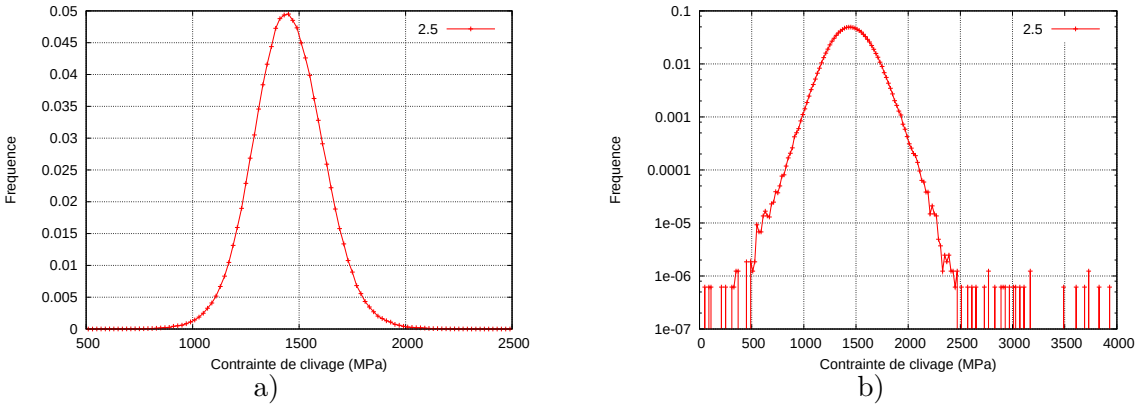


FIG. *A.1. Distribution de contrainte de clivage au 2.5% déformation équivalente*

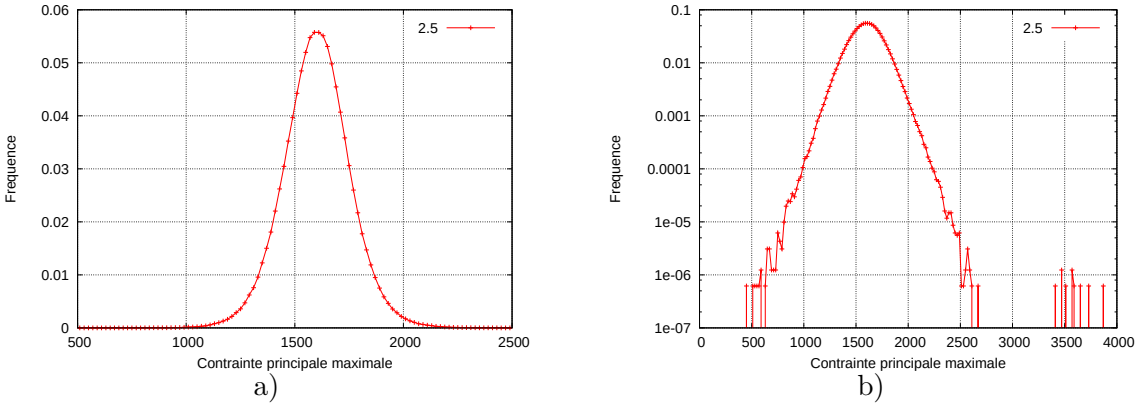


FIG. *A.2. Distribution de contrainte principale maximale au 2.5% déformation équivalente*

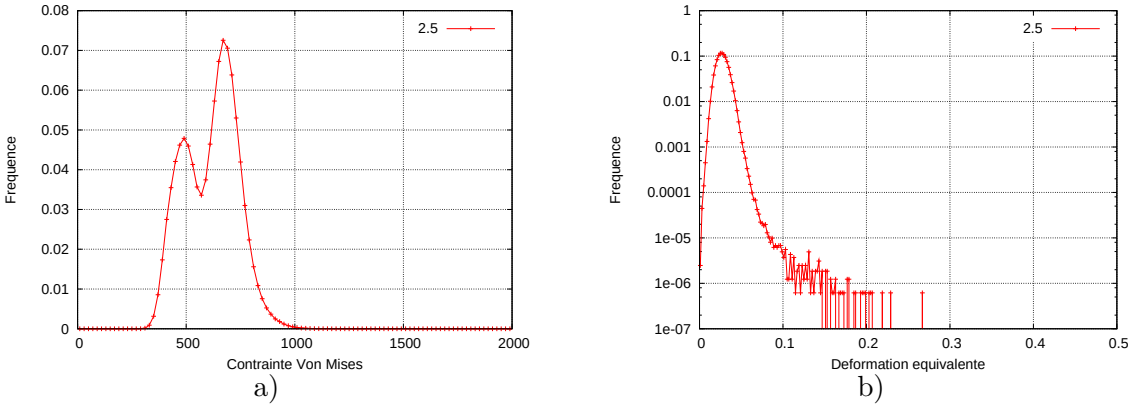
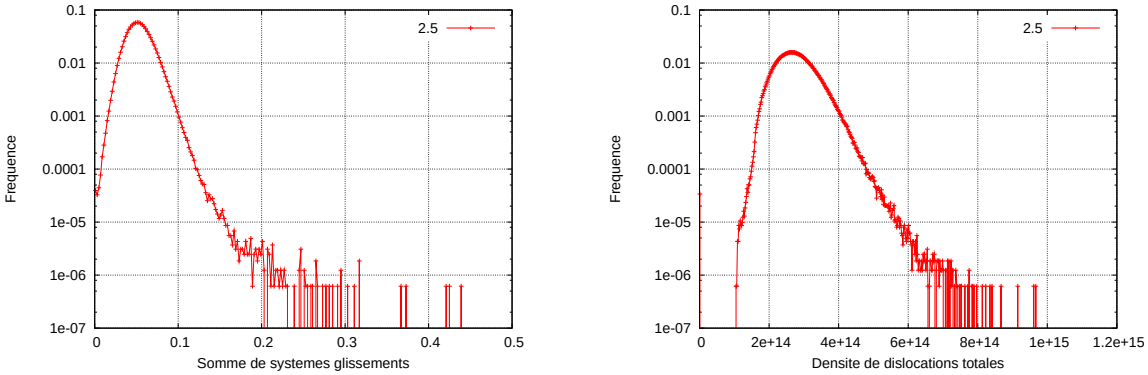


FIG. *A.3. Distribution de contrainte Von Mises a) et déformation équivalente b) au 2.5% déformation équivalente*



a) b)

FIG. *A.4. Distributions de la somme de systèmes glissement a) et la densité de dislocations totale b) au 2.5 % déformation équivalente*

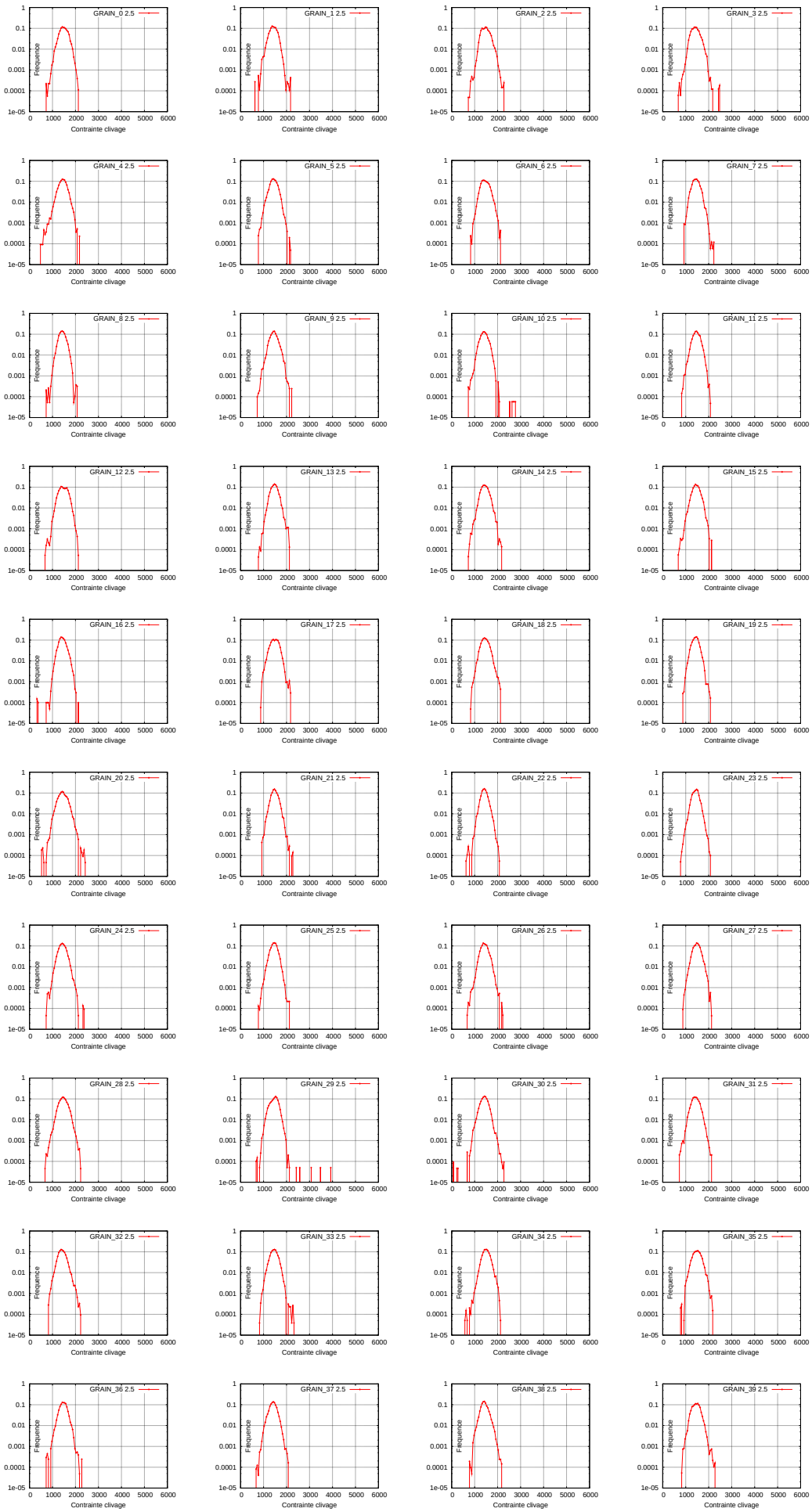


FIG. *A.5. Distribution de contrainte clivage dans les GRAINS (MPa)*

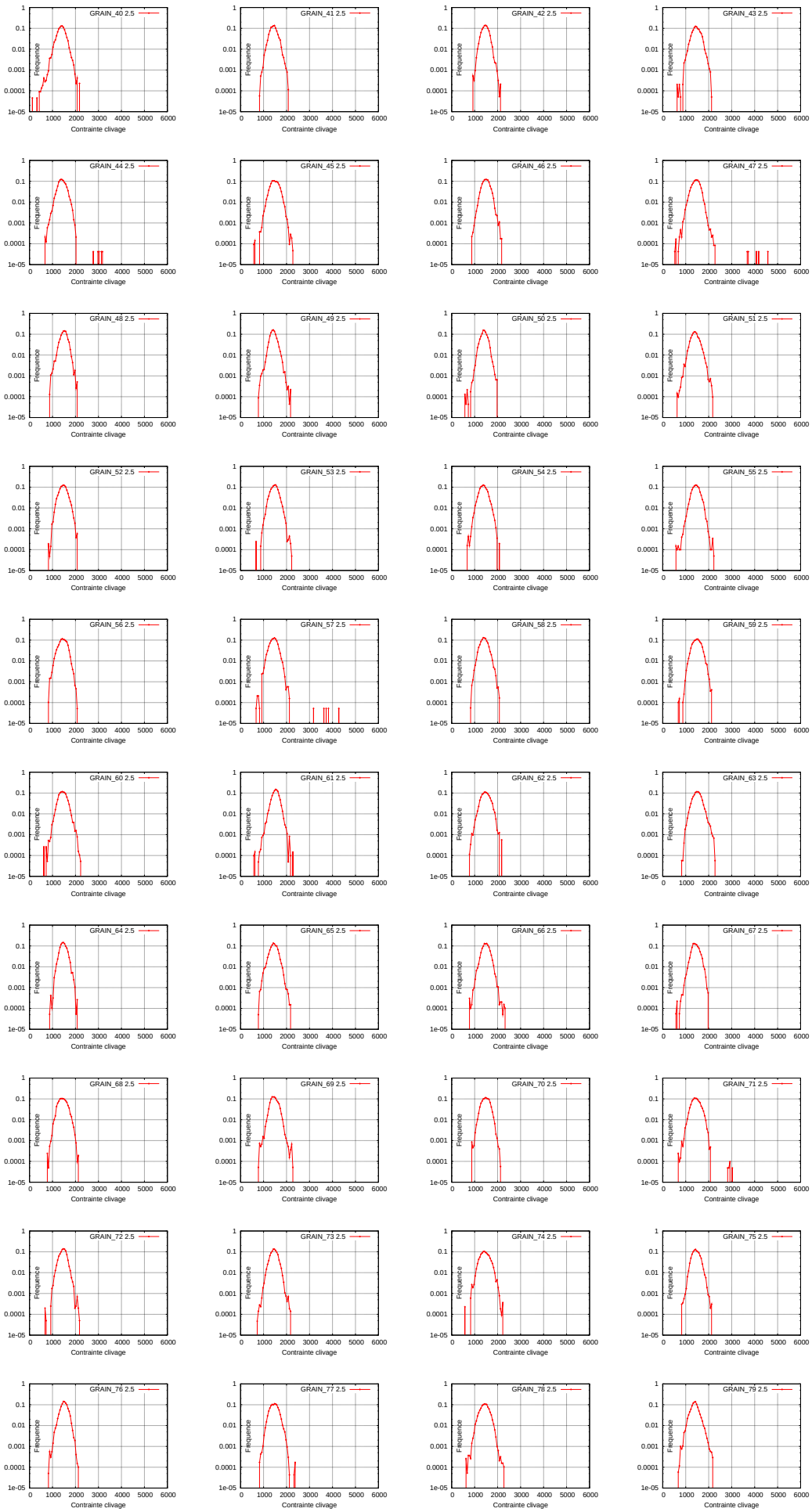


FIG. *A.6. Distribution de contrainte clivage dans les GRAINS (MPa)*

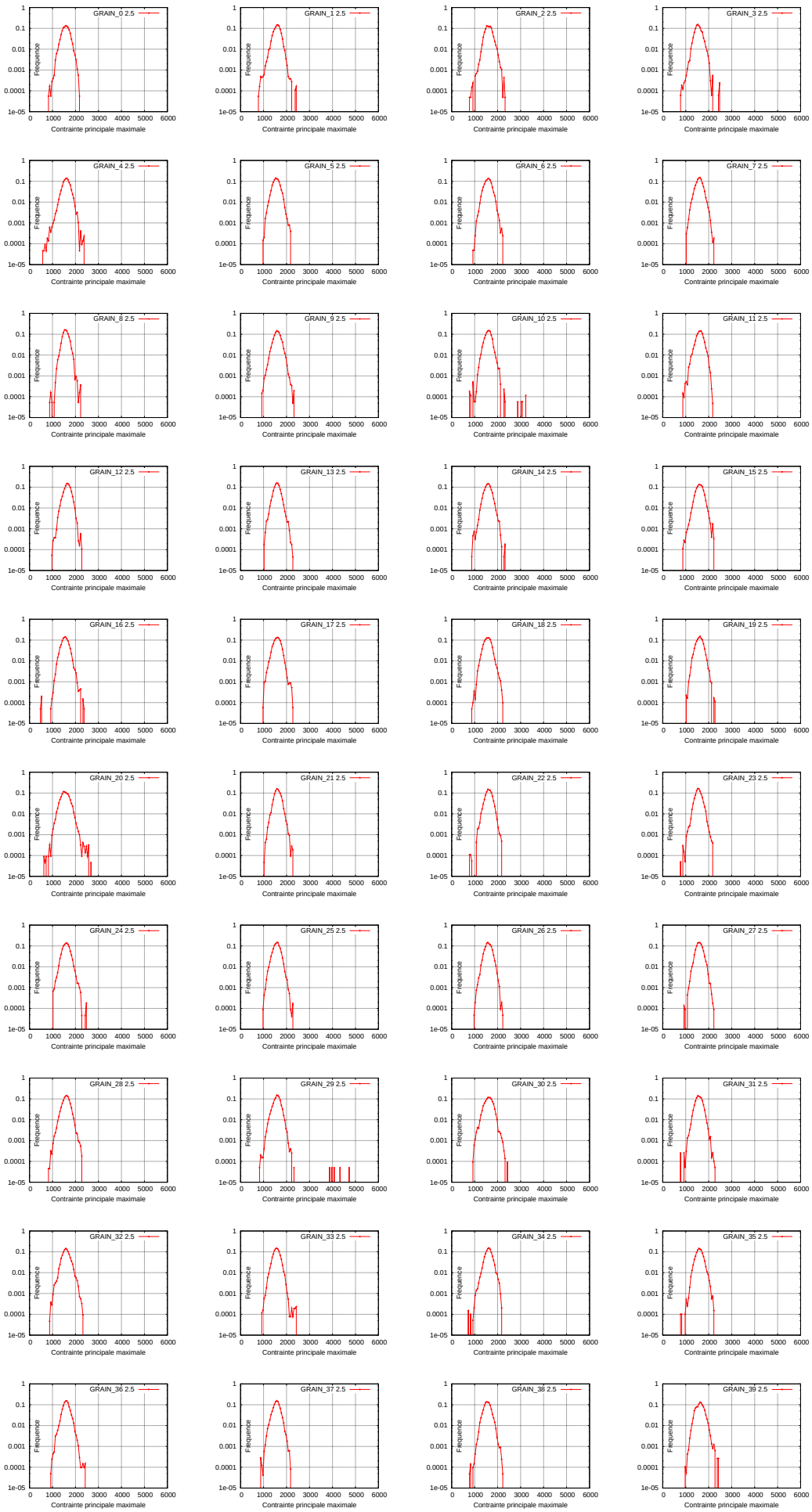


FIG. *A.7. Distribution de contrainte principale maximale dans les GRAINS (MPa)*

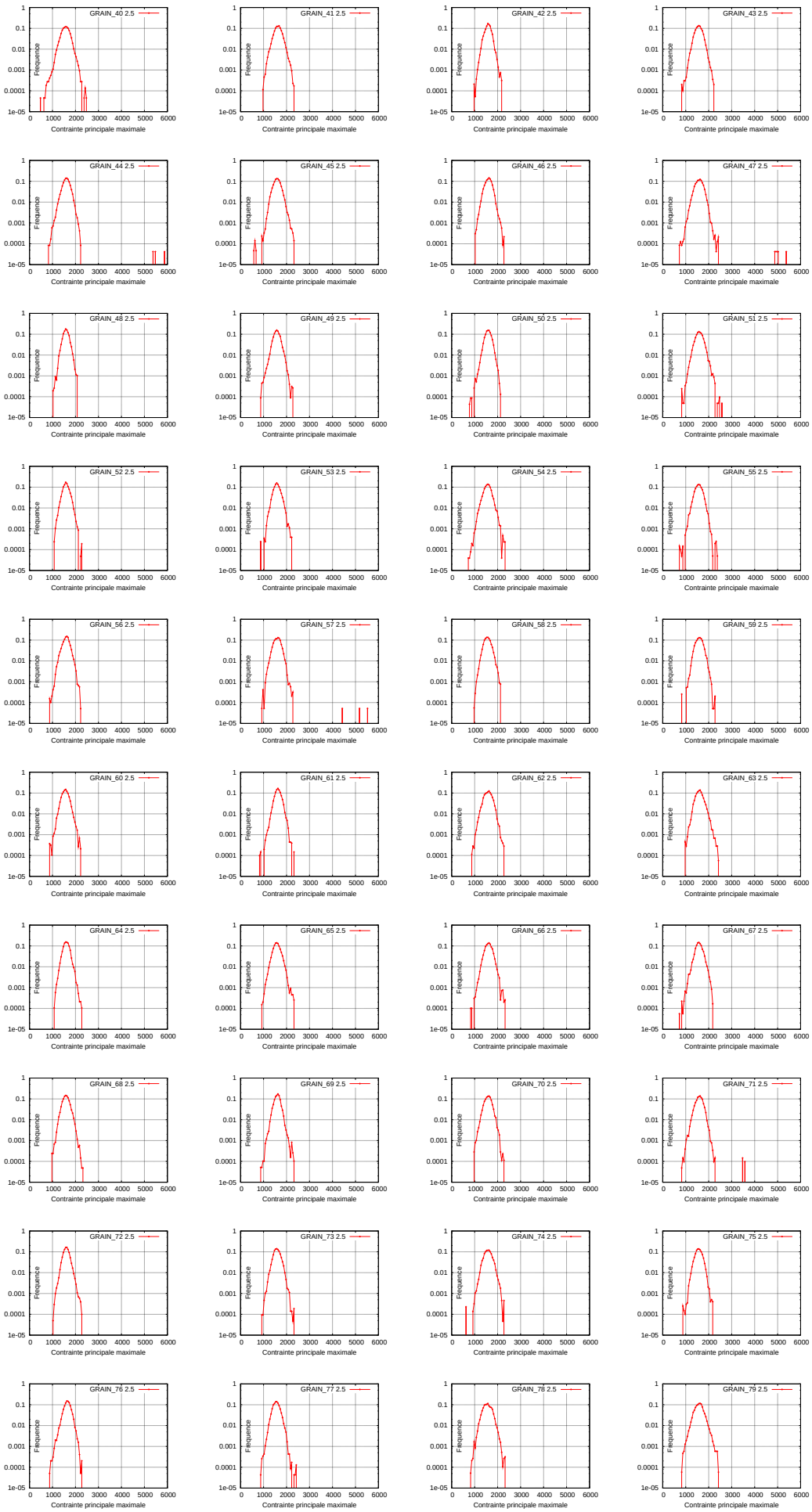


FIG. *A.8. Distribution de contrainte principale maximale dans les GRAINS (MPa)*

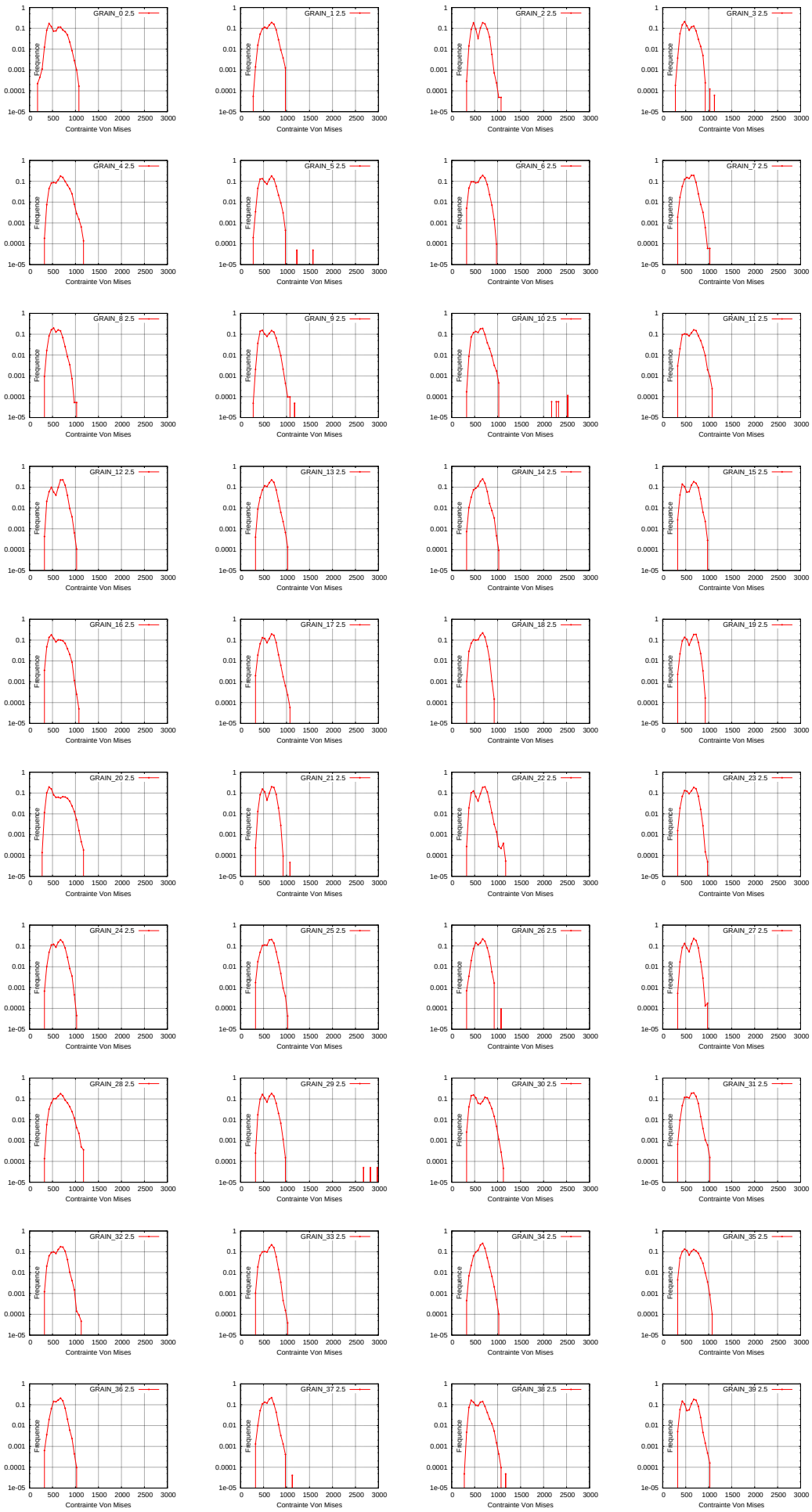


FIG. *A.9. Distribution de contrainte Von Mises dans les GRAINS (MPa)*

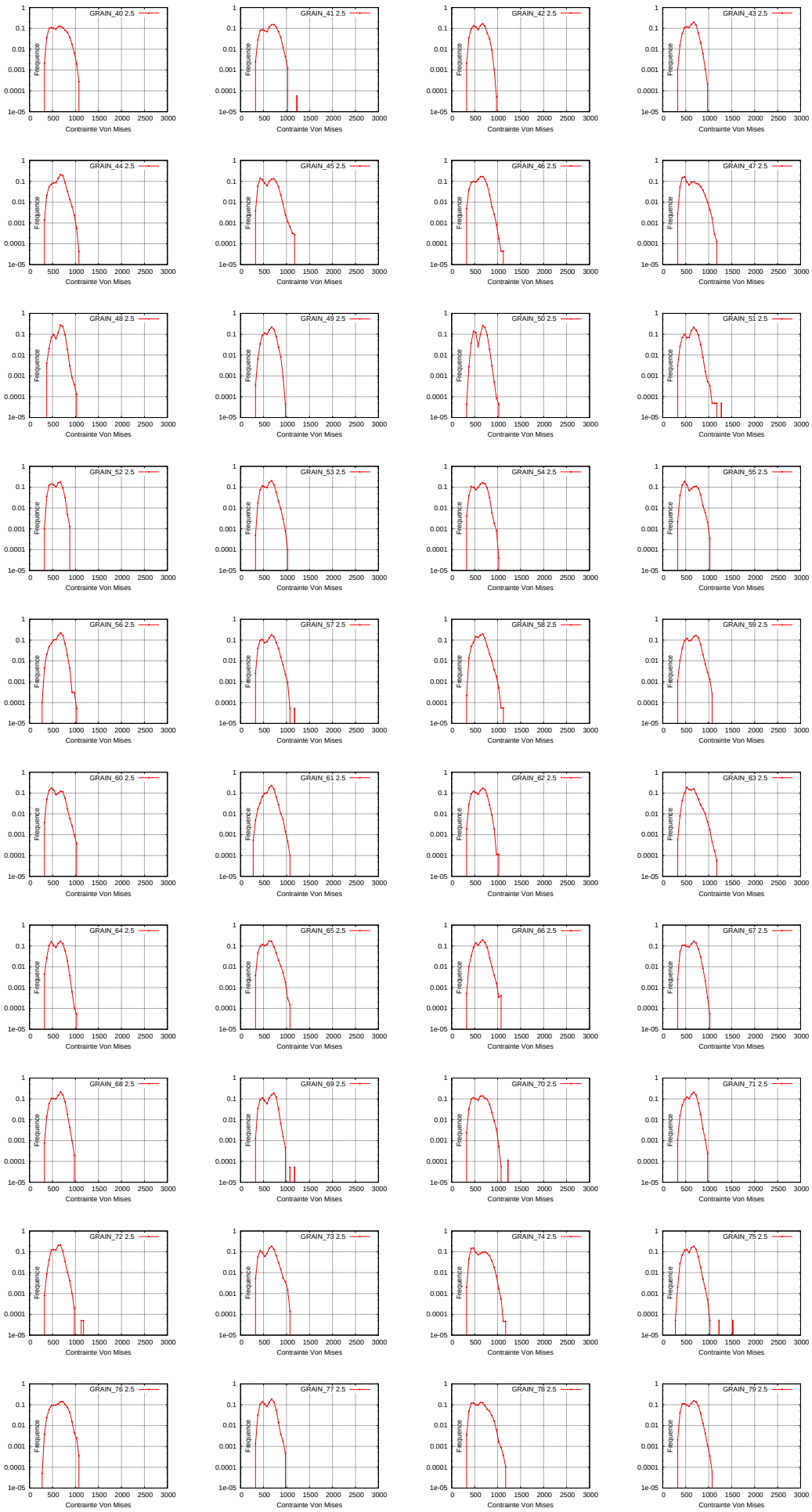


FIG. *A.10. Distribution de contrainte Von Mises dans les GRAINS (MPa)*

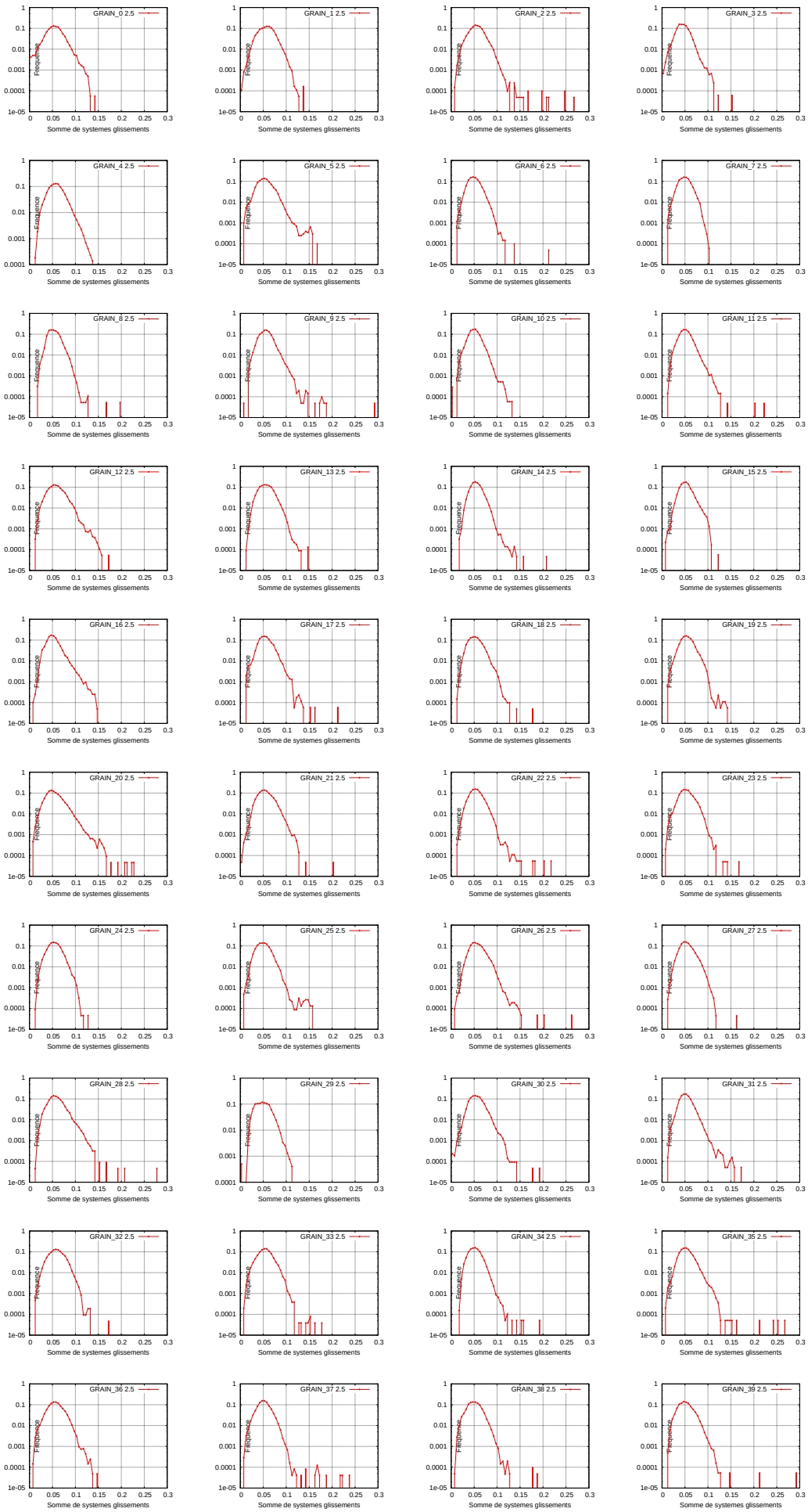


FIG. *A.11. Distribution de la somme de glissements des systèmes dans les GRAINS*

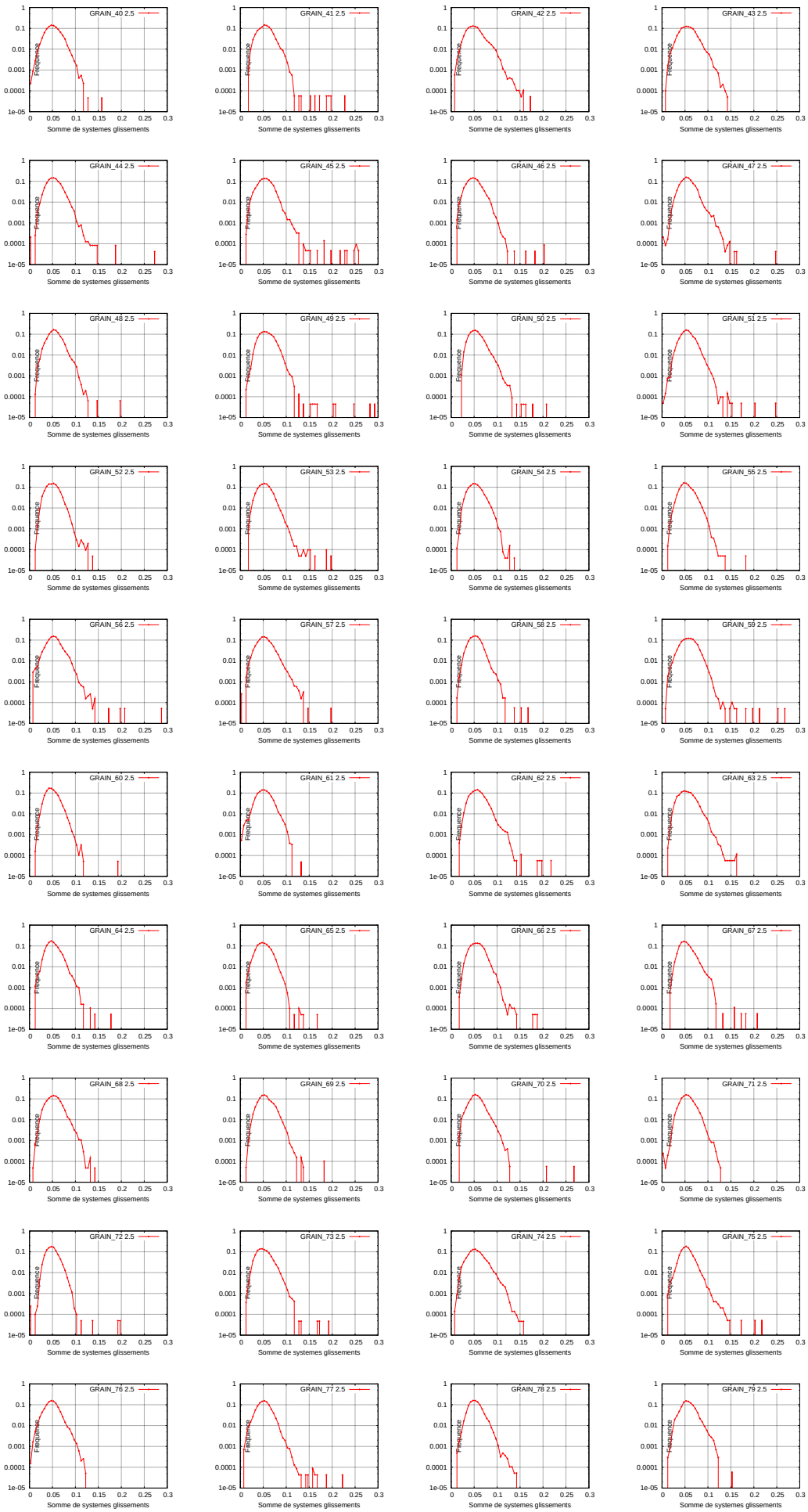


FIG. *A.12. Distribution de la somme de glissements des systèmes dans les GRAINS*

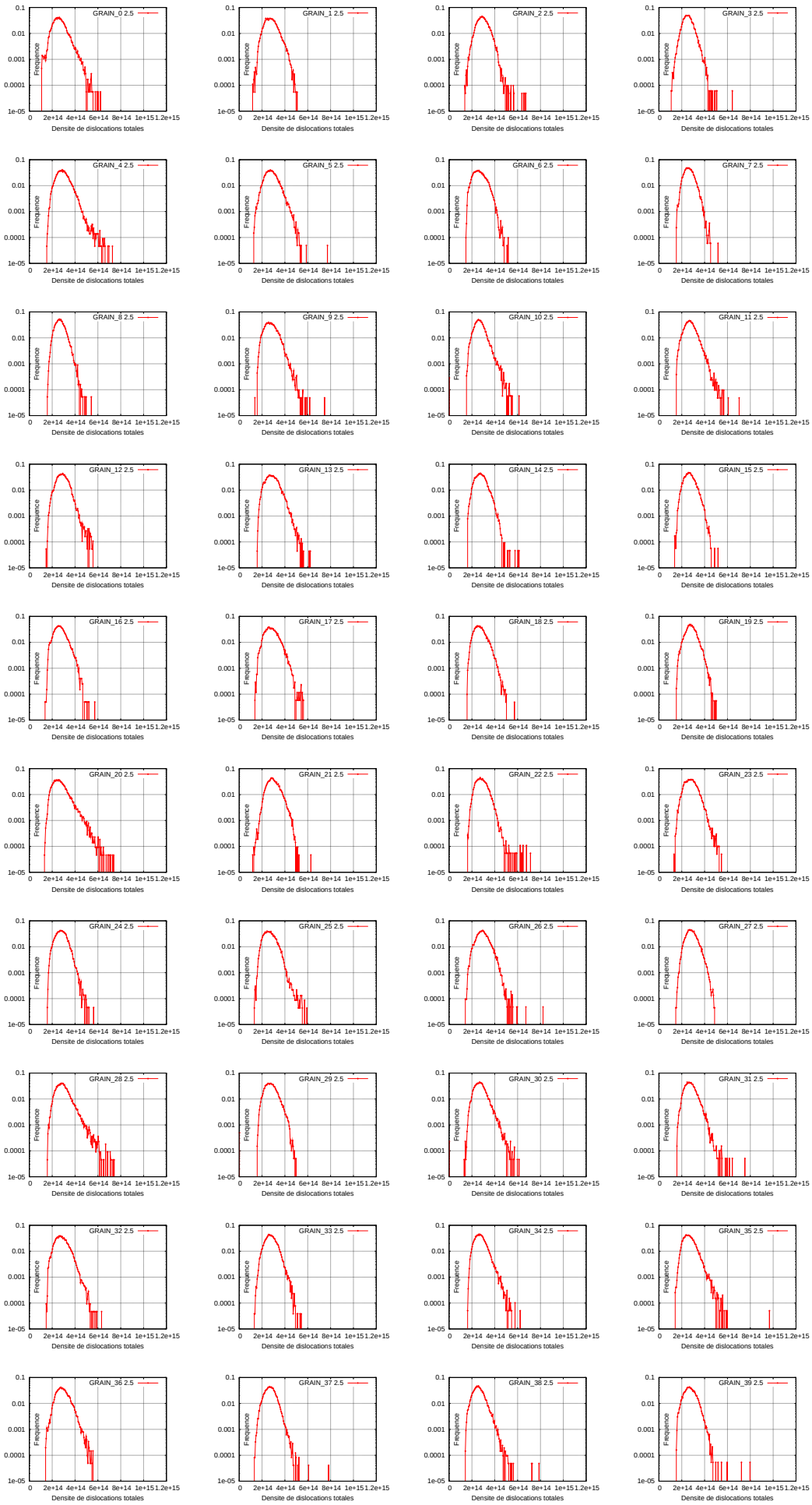


FIG. *A.13. Distribution de la densité de dislocations totales dans les GRAINS*

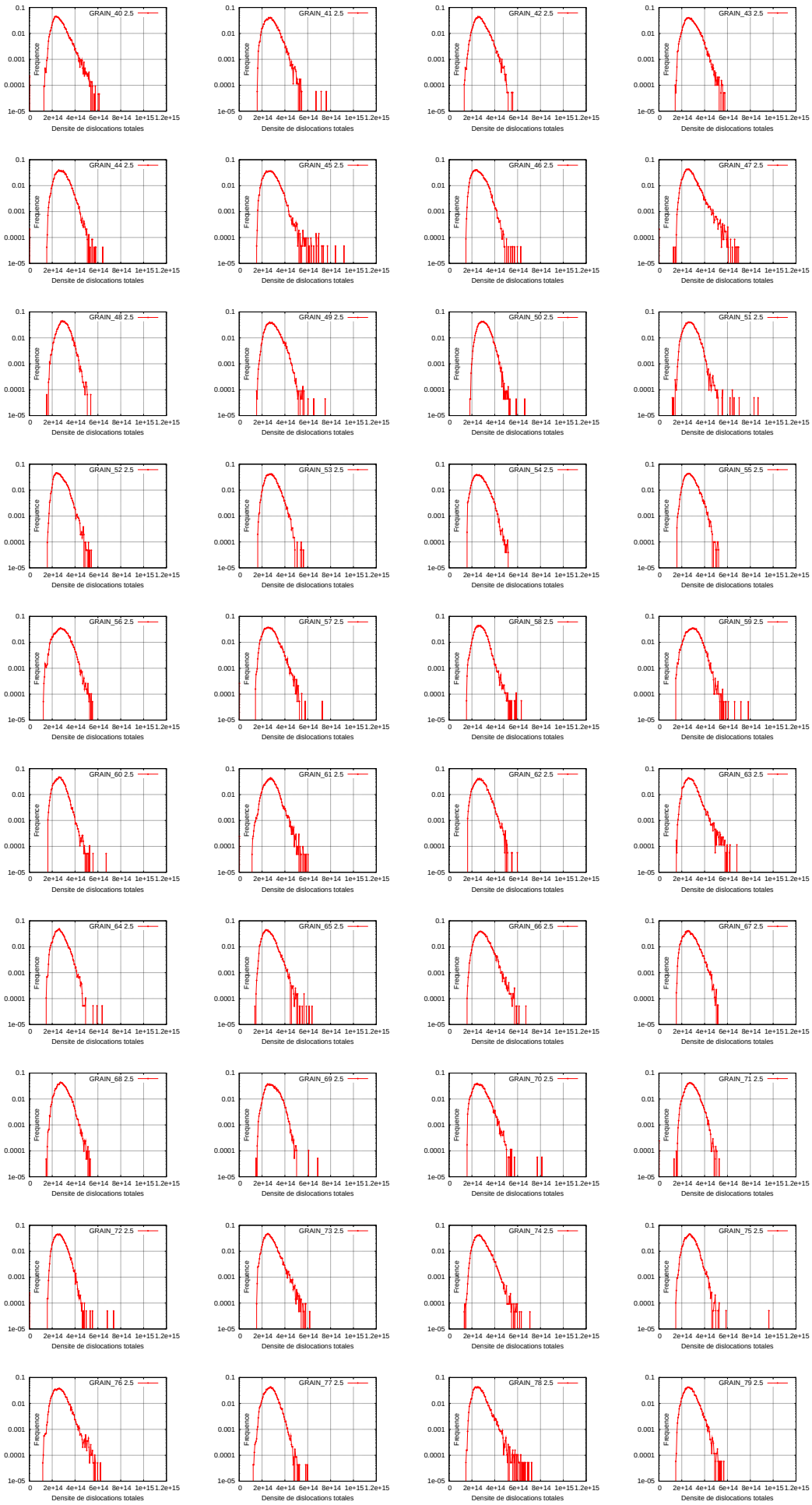


FIG. *A.14. Distribution de la densité de dislocations totales dans les GRAINS*

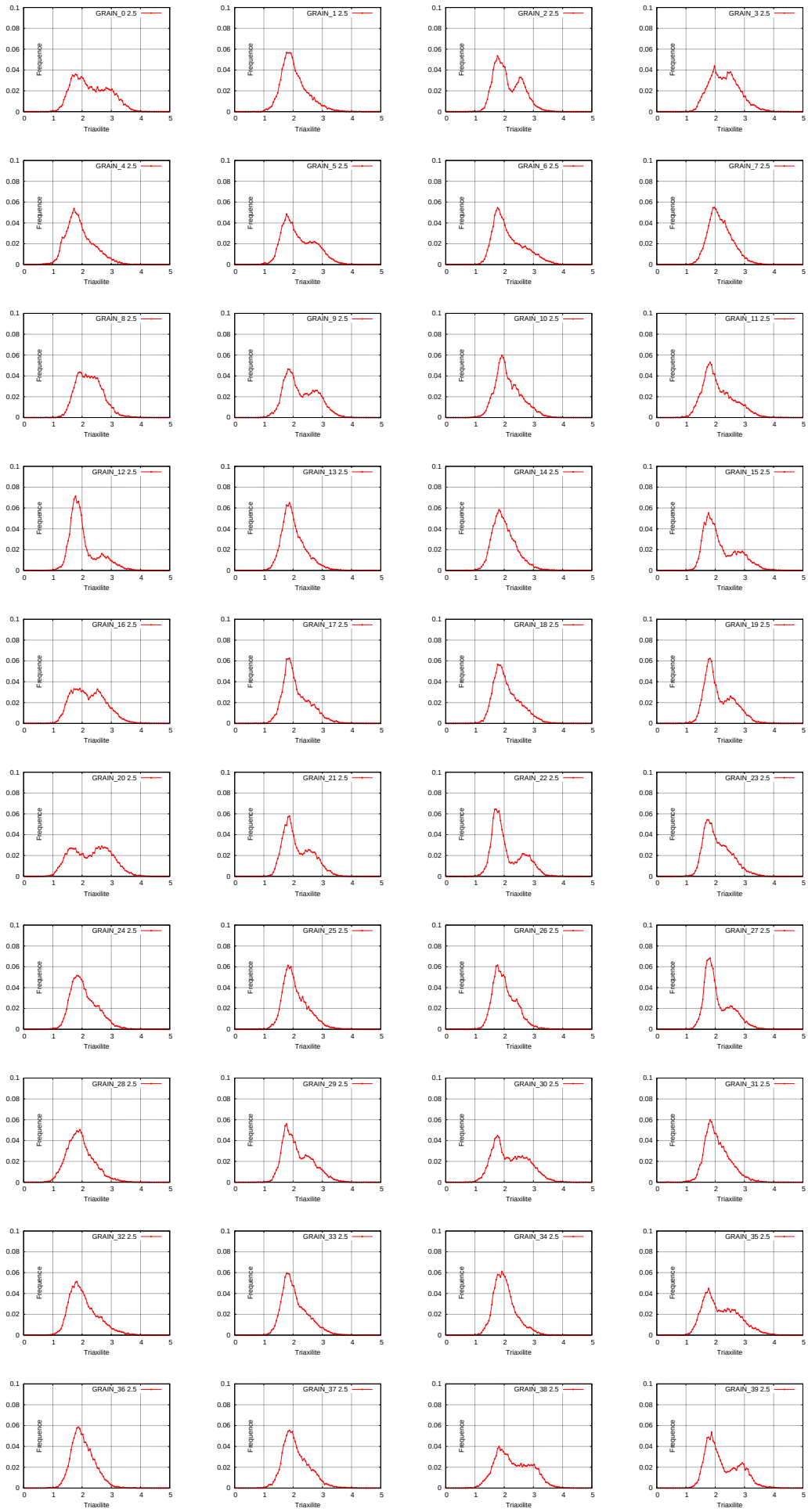


FIG. *A.15. Distribution de la triaxilité dans les GRAINS*

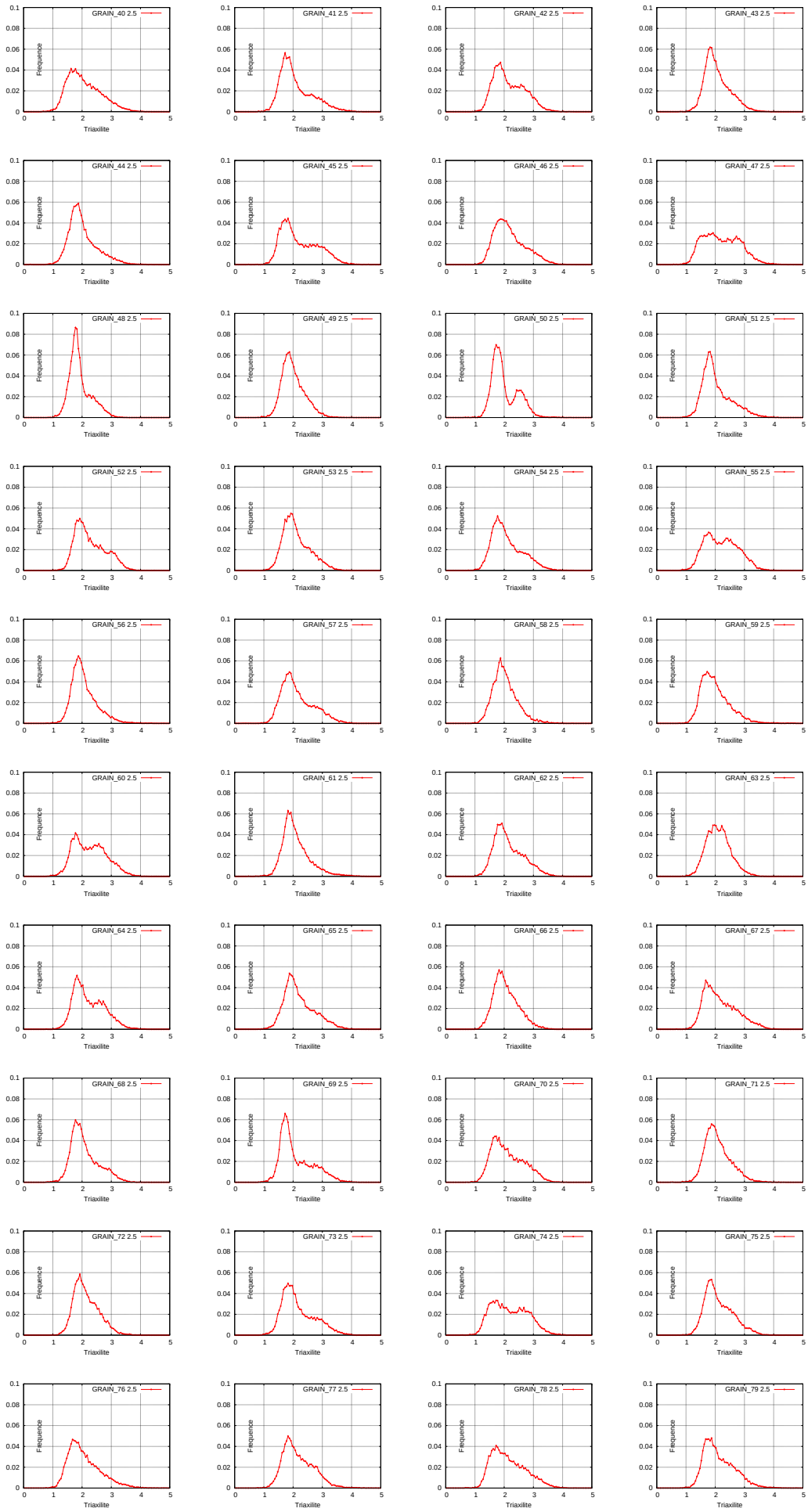


FIG. *A.16. Distribution de la triaxilité dans les GRAINS*

A.1.2 Matériaux non irradié à température −60°C

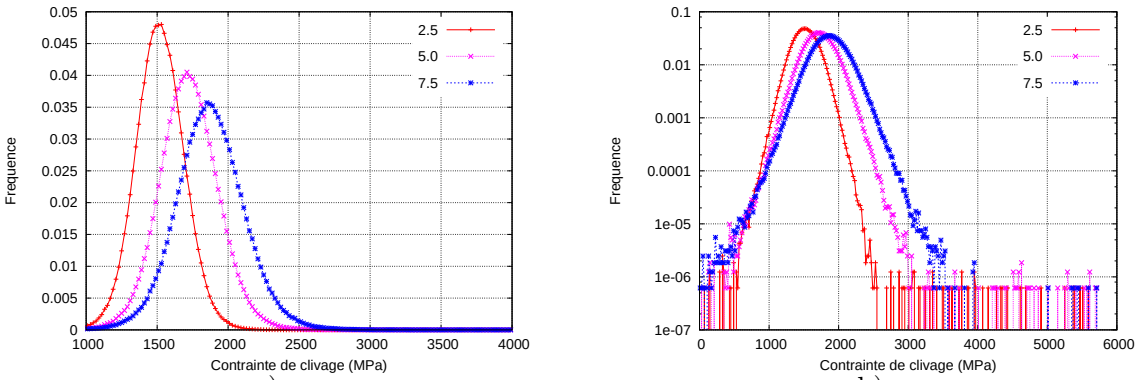


FIG. *A.17. Distribution de contrainte de clivage au 2.5%, 5.0%, 7.5% déformation équivalente*

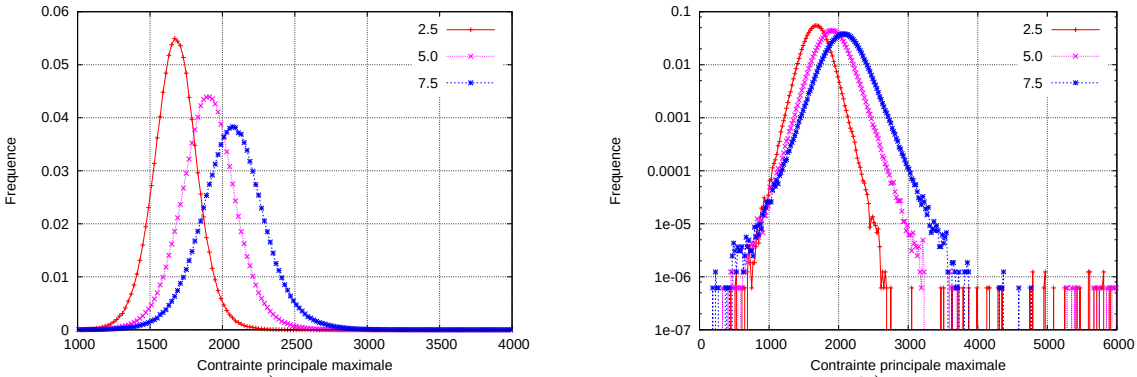


FIG. *A.18. Distribution de contrainte principale maximale au 2.5%, 5.0%, 7.5% déformation équivalente*

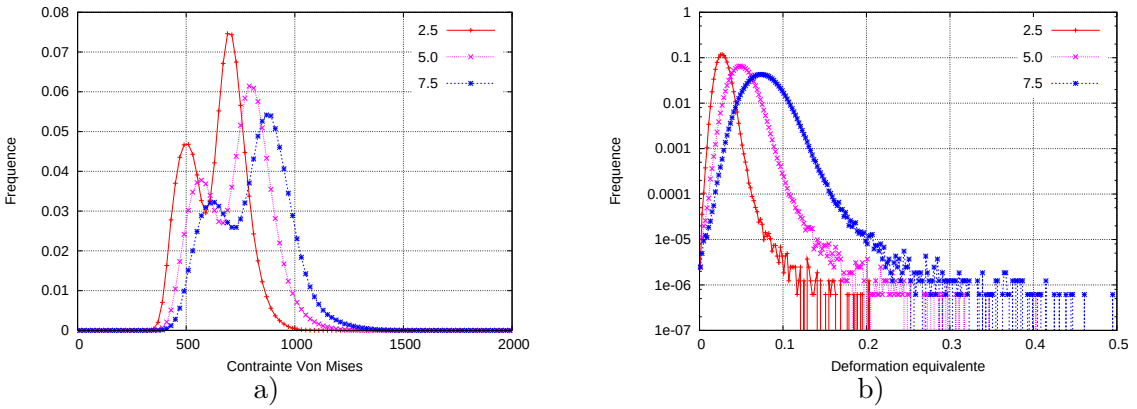


FIG. *A.19. Distribution de contrainte Von Mises a) et déformation équivalente b) au 2.5%, 5.0%, 7.5% déformation équivalente*

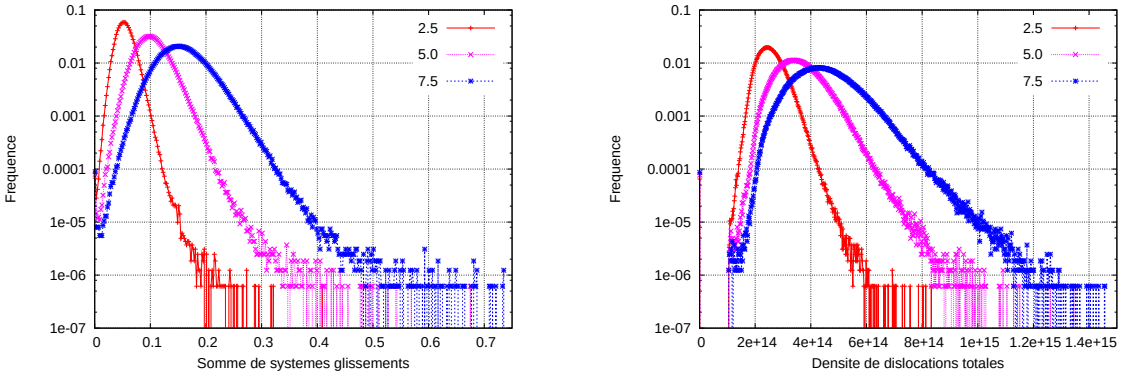


FIG. *A.20. Distributions de la somme de systèmes glissement a) et la densité de dislocations totale b) au 2.5 %, 5.0%, 7.5% déformation équivalente*

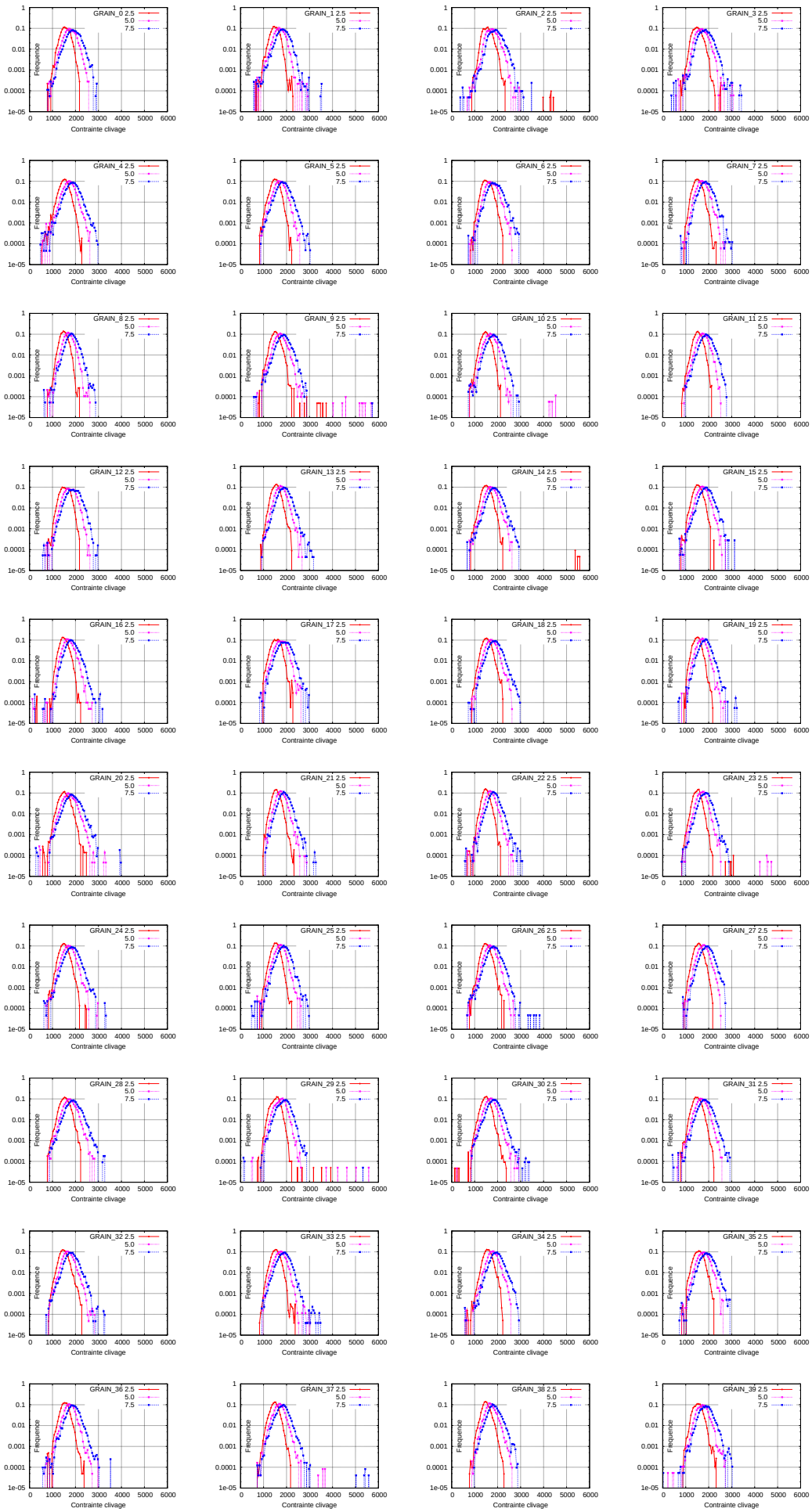


FIG. *A.21. Distribution de contrainte clivage dans les GRAINS (MPa)*

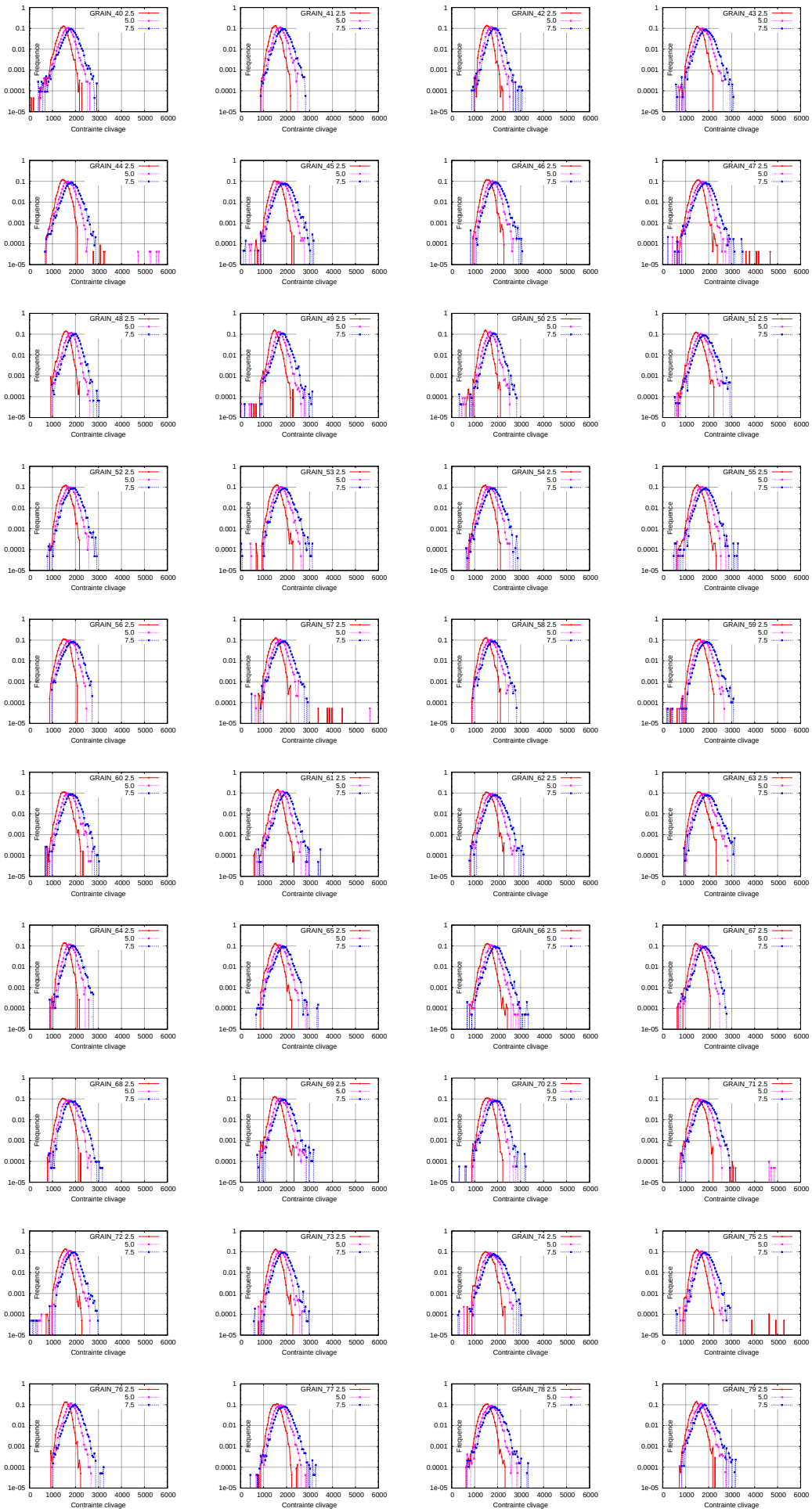


FIG. *A.22. Distribution de contrainte clivage dans les GRAINS (MPa)*

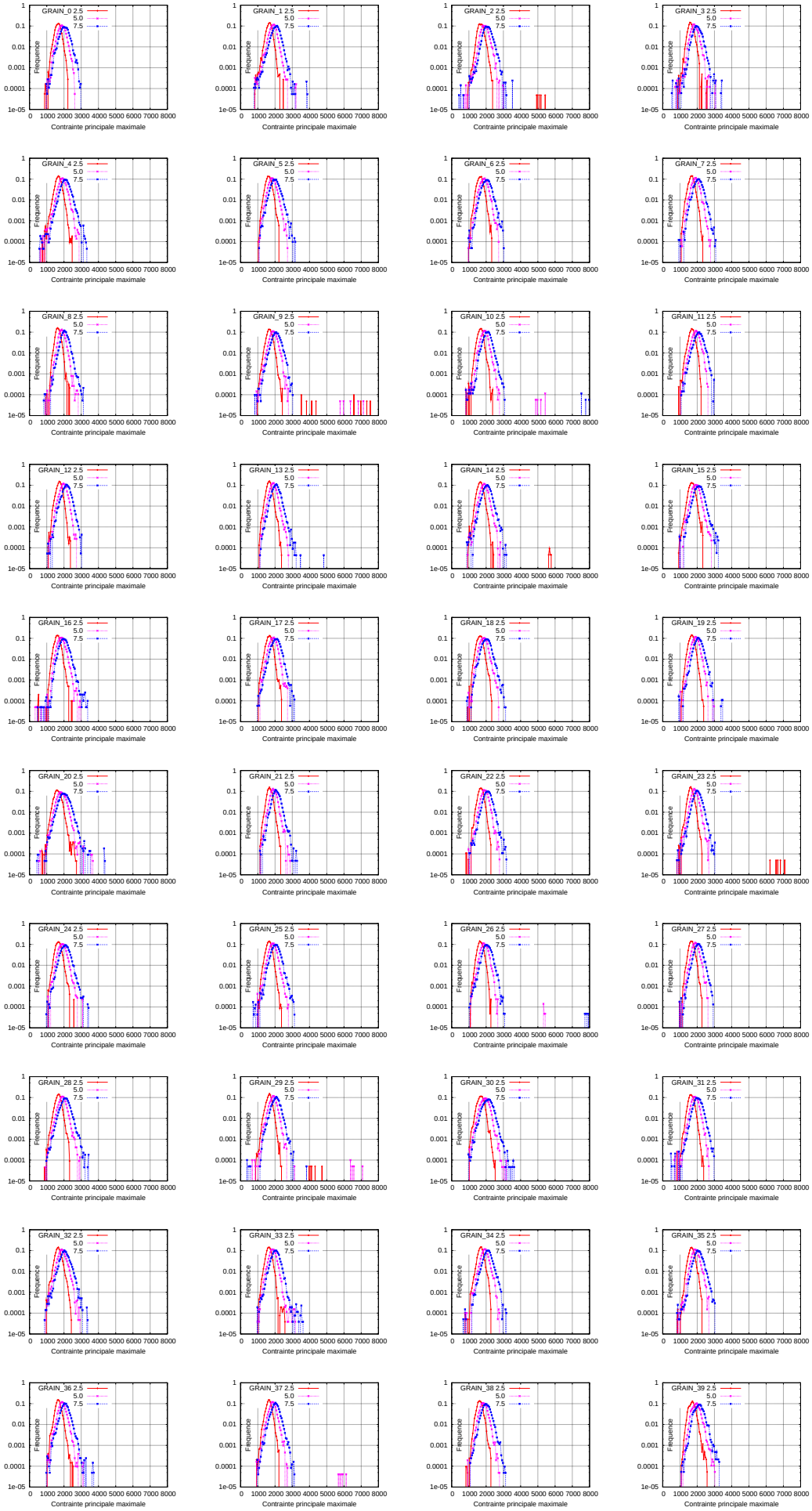


FIG. *A.23. Distribution de contrainte principale maximale dans les GRAINS (MPa)*

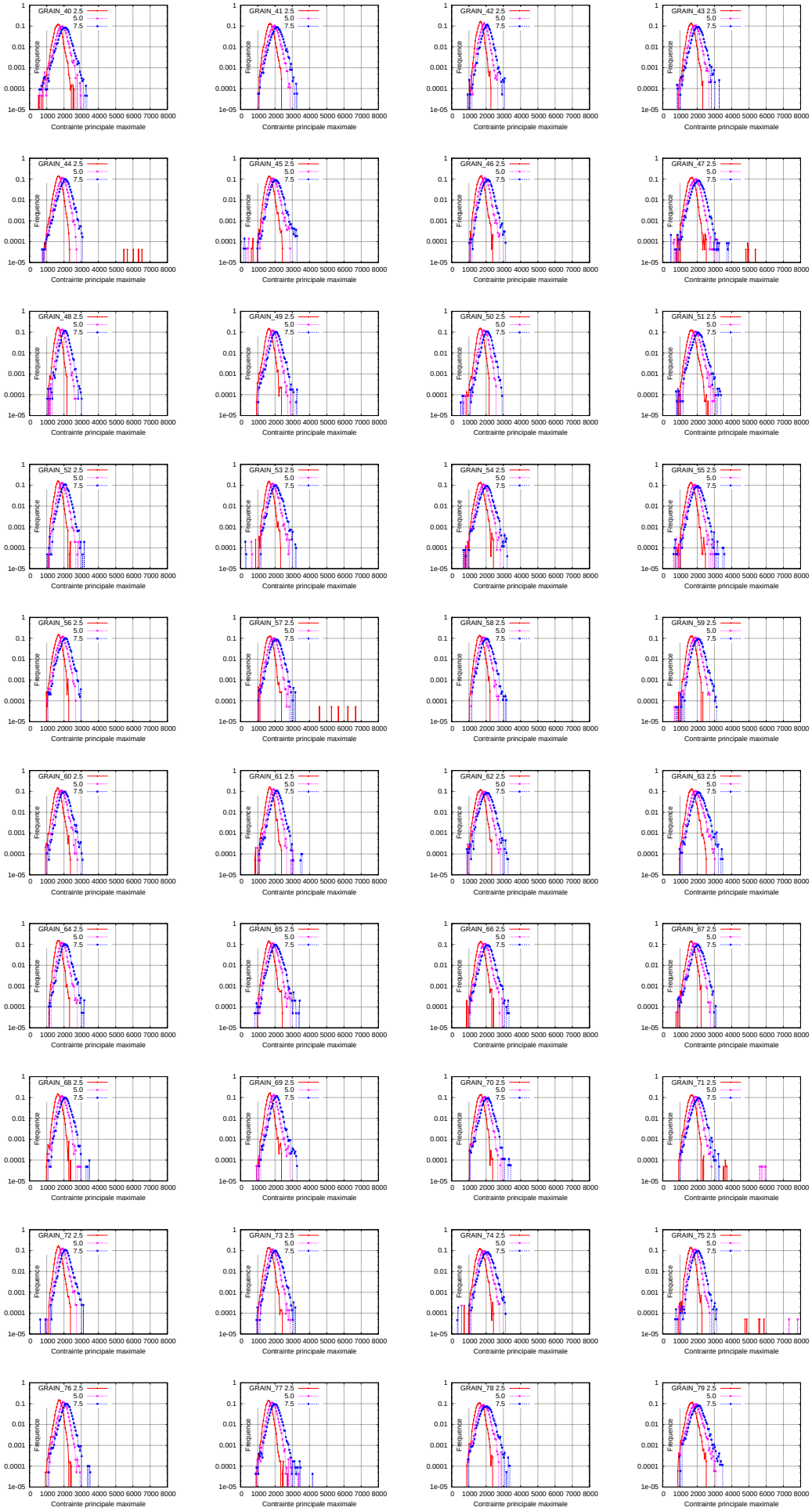


FIG. *A.24. Distribution de contrainte principale maximale dans les GRAINS (MPa)*

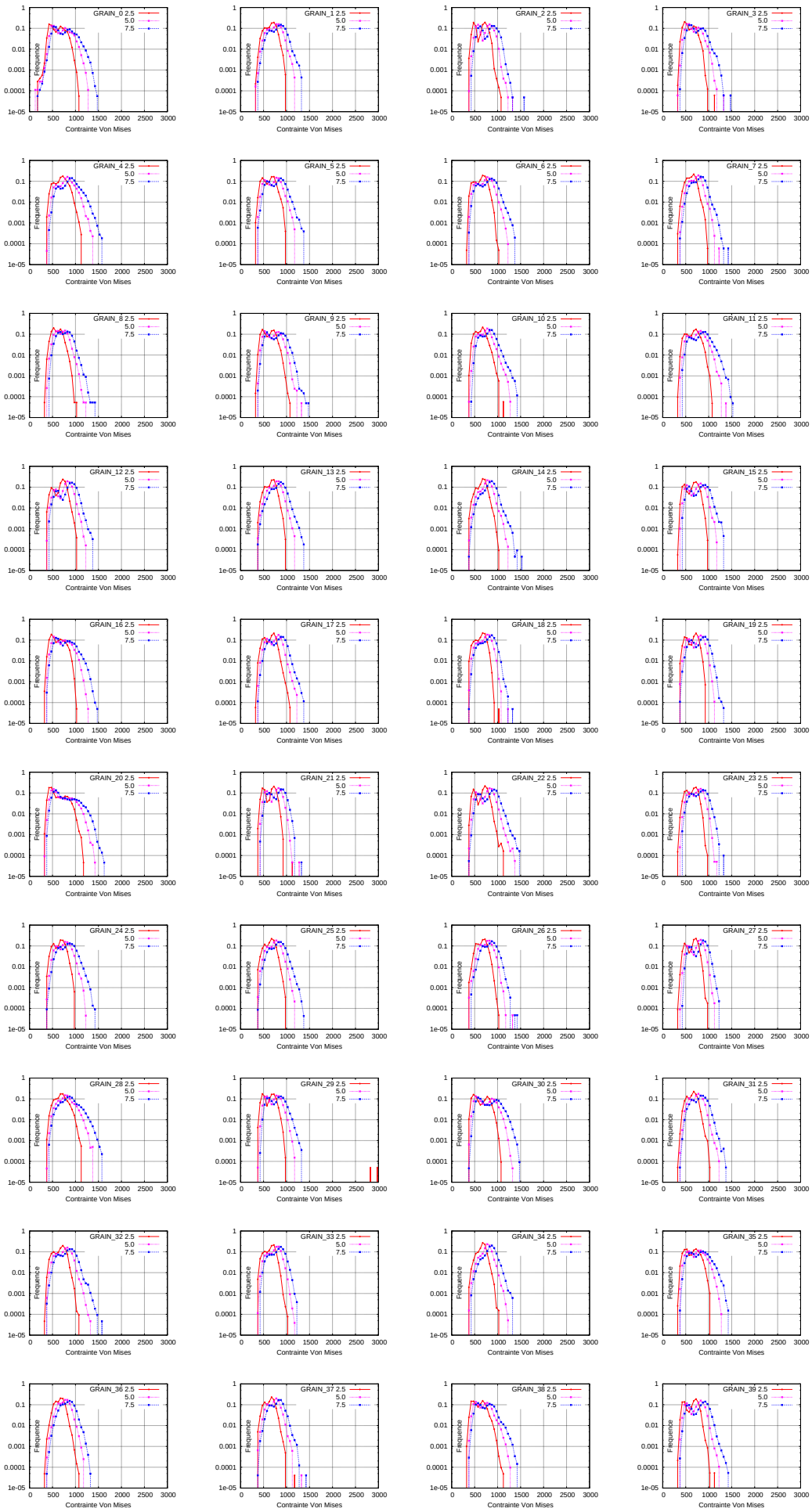


FIG. *A.25. Distribution de contrainte Von Mises dans les GRAINS (MPa)*

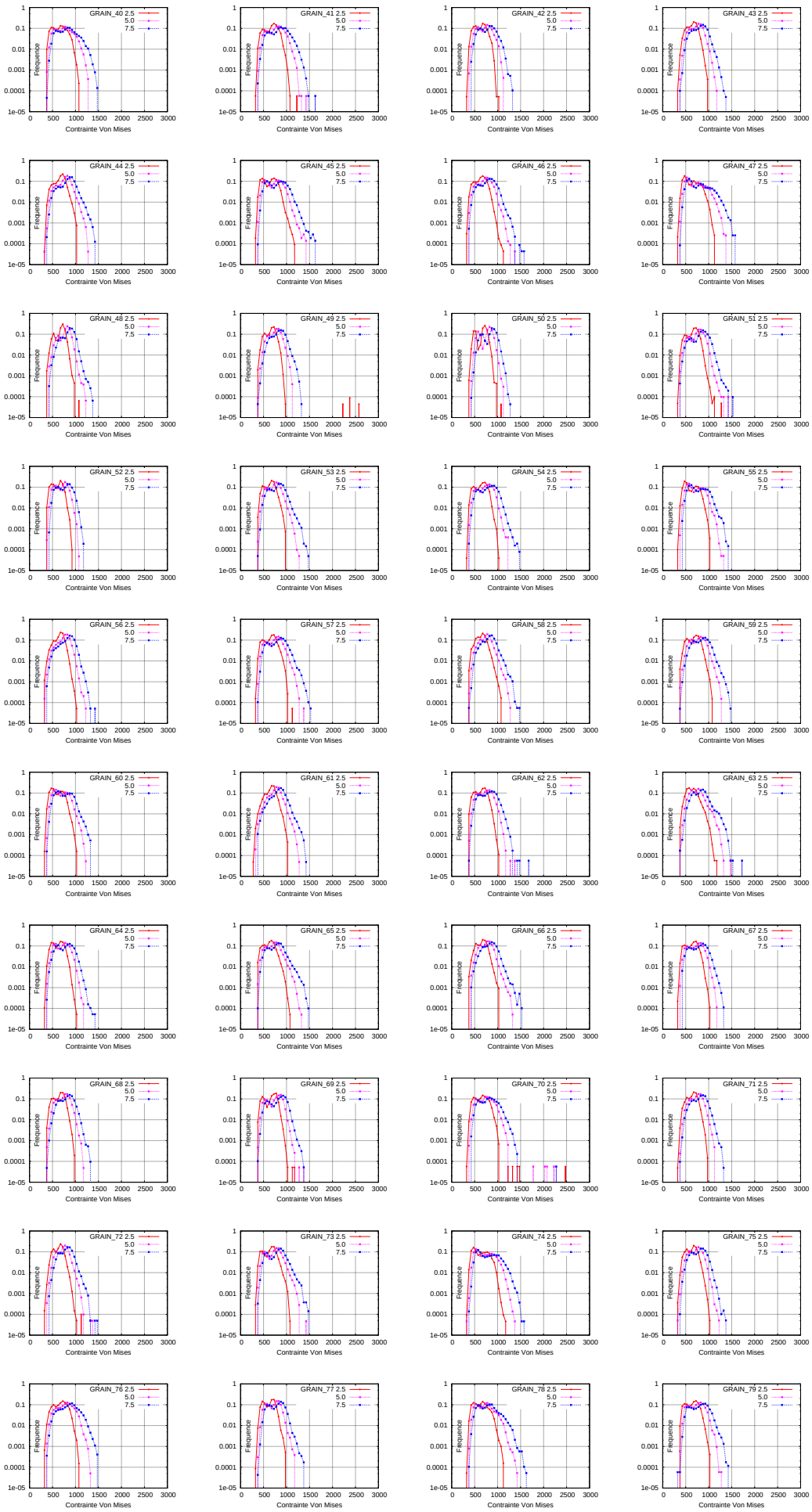


FIG. *A.26. Distribution de contrainte Von Mises dans les GRAINS (MPa)*

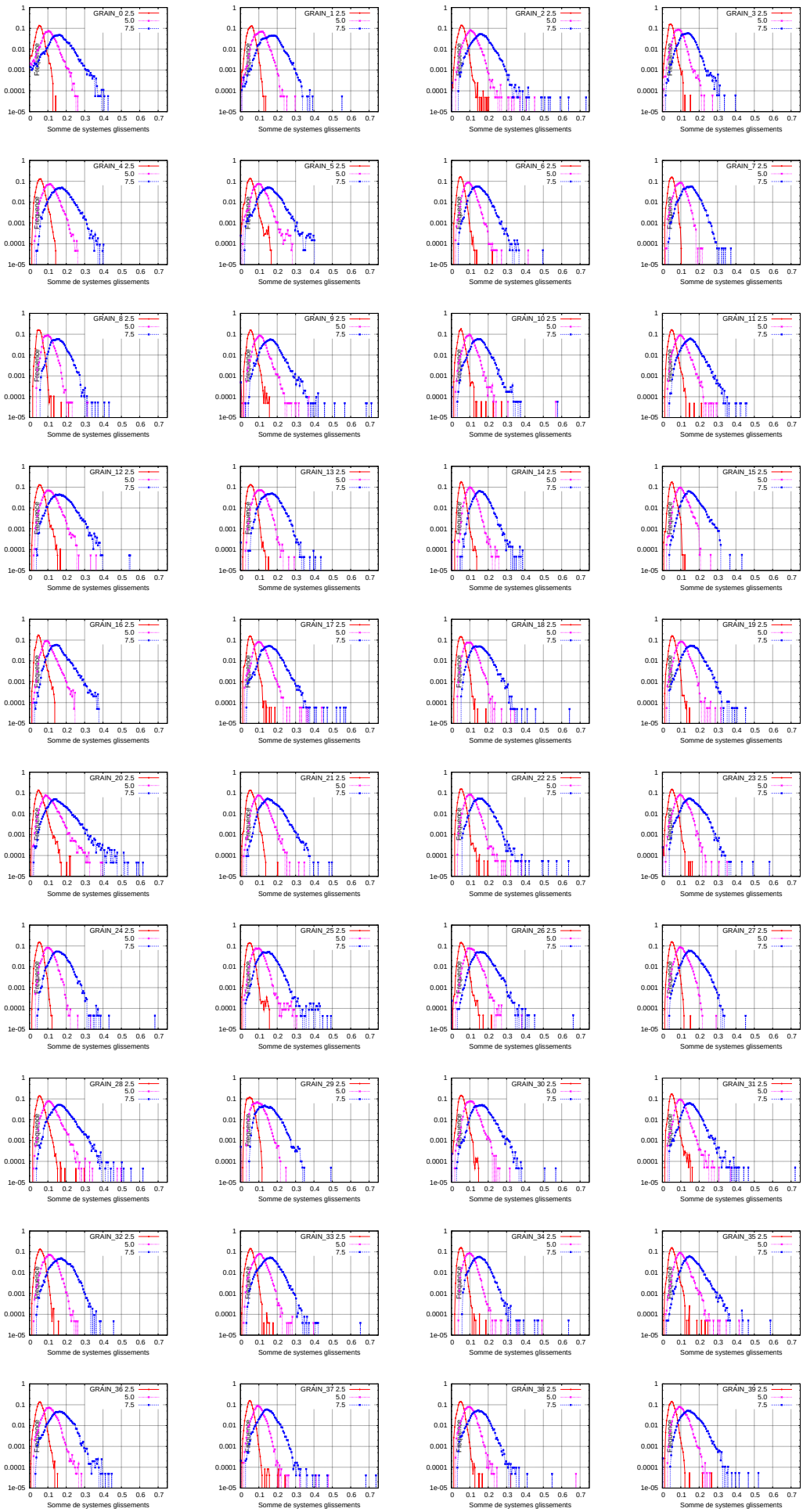


FIG. *A.27. Distribution de la somme de glissements des systèmes dans les GRAINS*

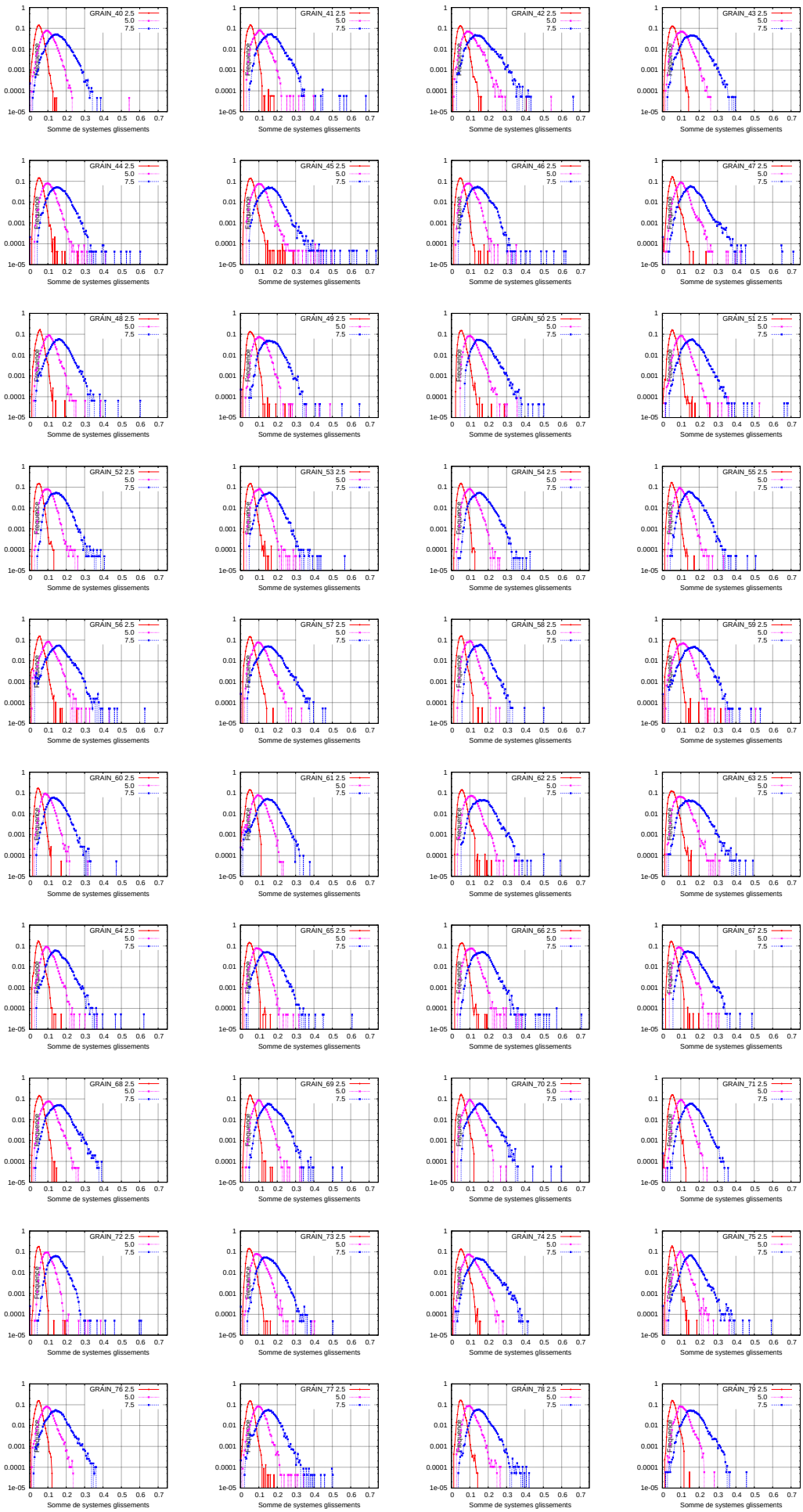


FIG. *A.28. Distribution de la somme de glissements des systèmes dans les GRAINS*

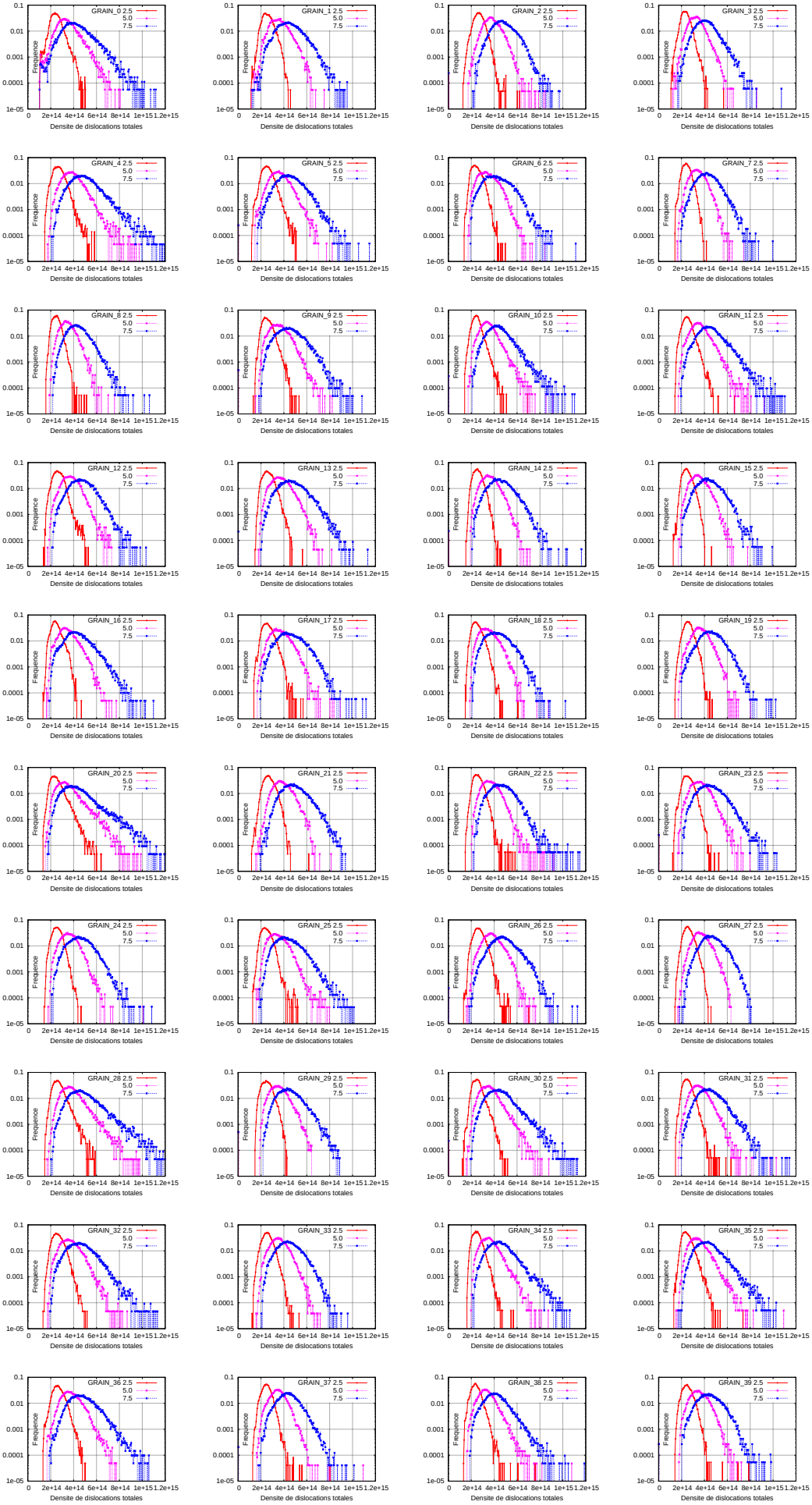


FIG. *A.29. Distribution de la densité de dislocations totales dans les GRAINS*

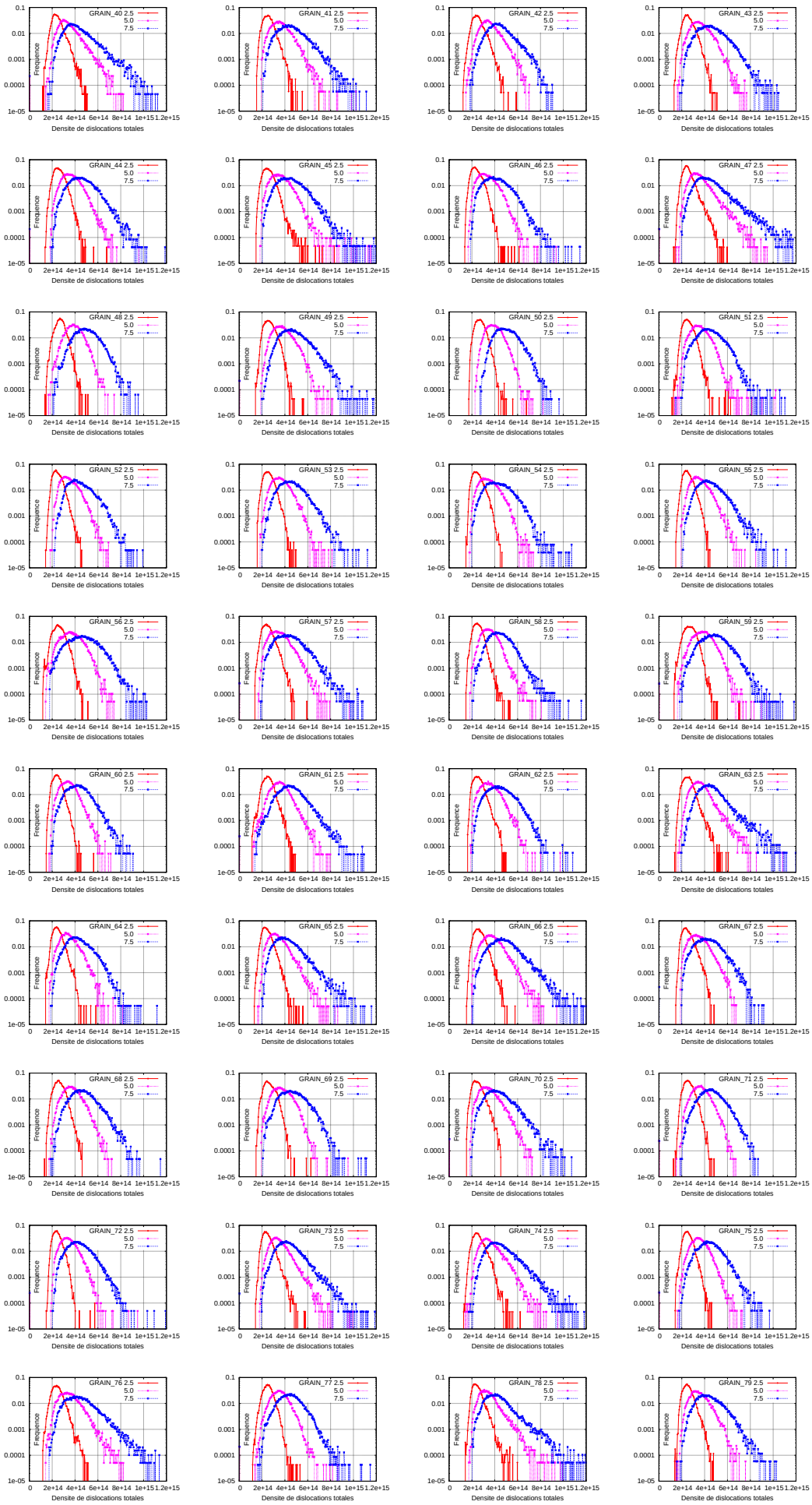


FIG. *A.30. Distribution de la densité de dislocations totales dans les GRAINS*

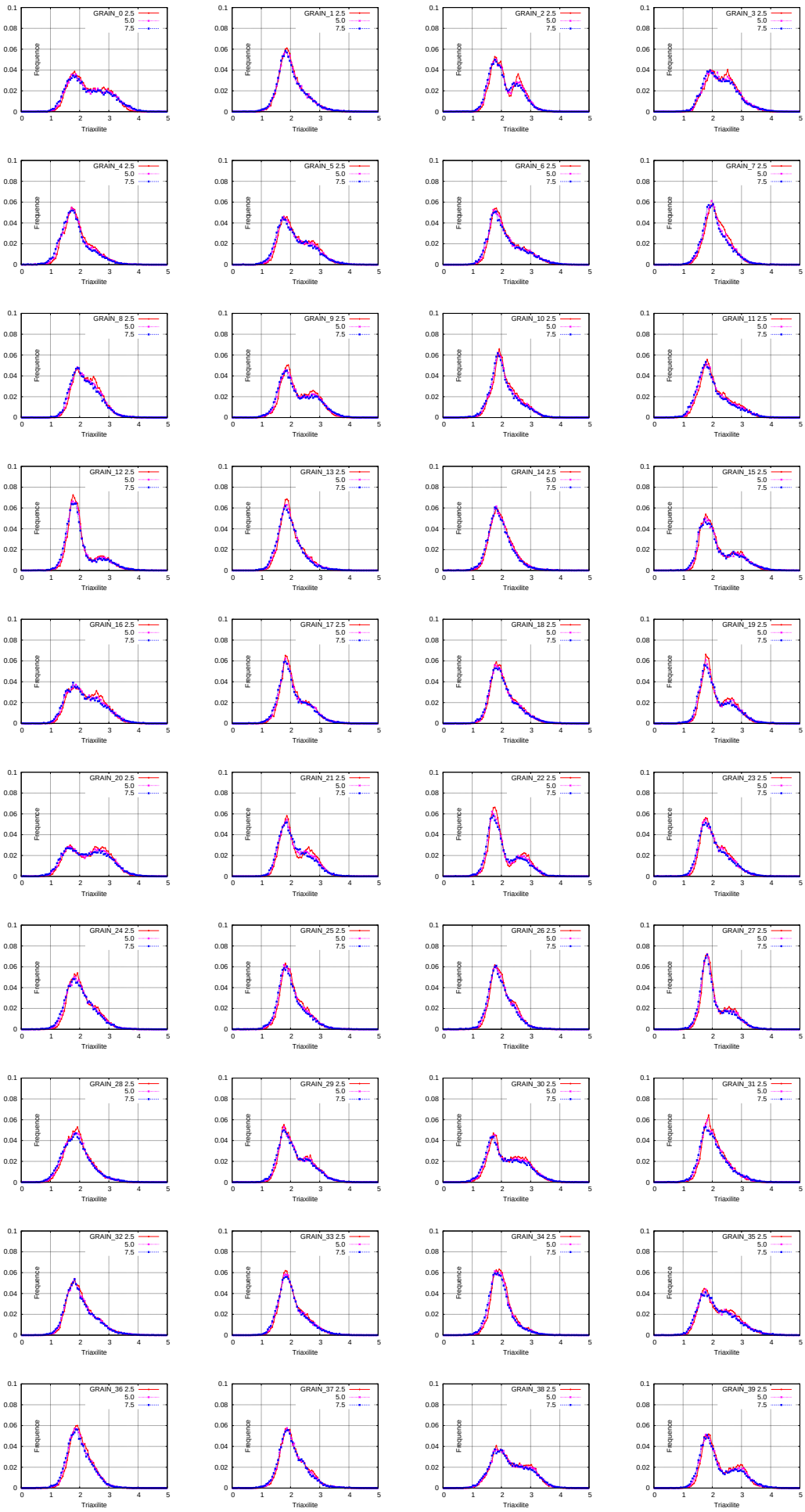


FIG. *A.31. Distribution de la triaxilité dans les GRAINS*

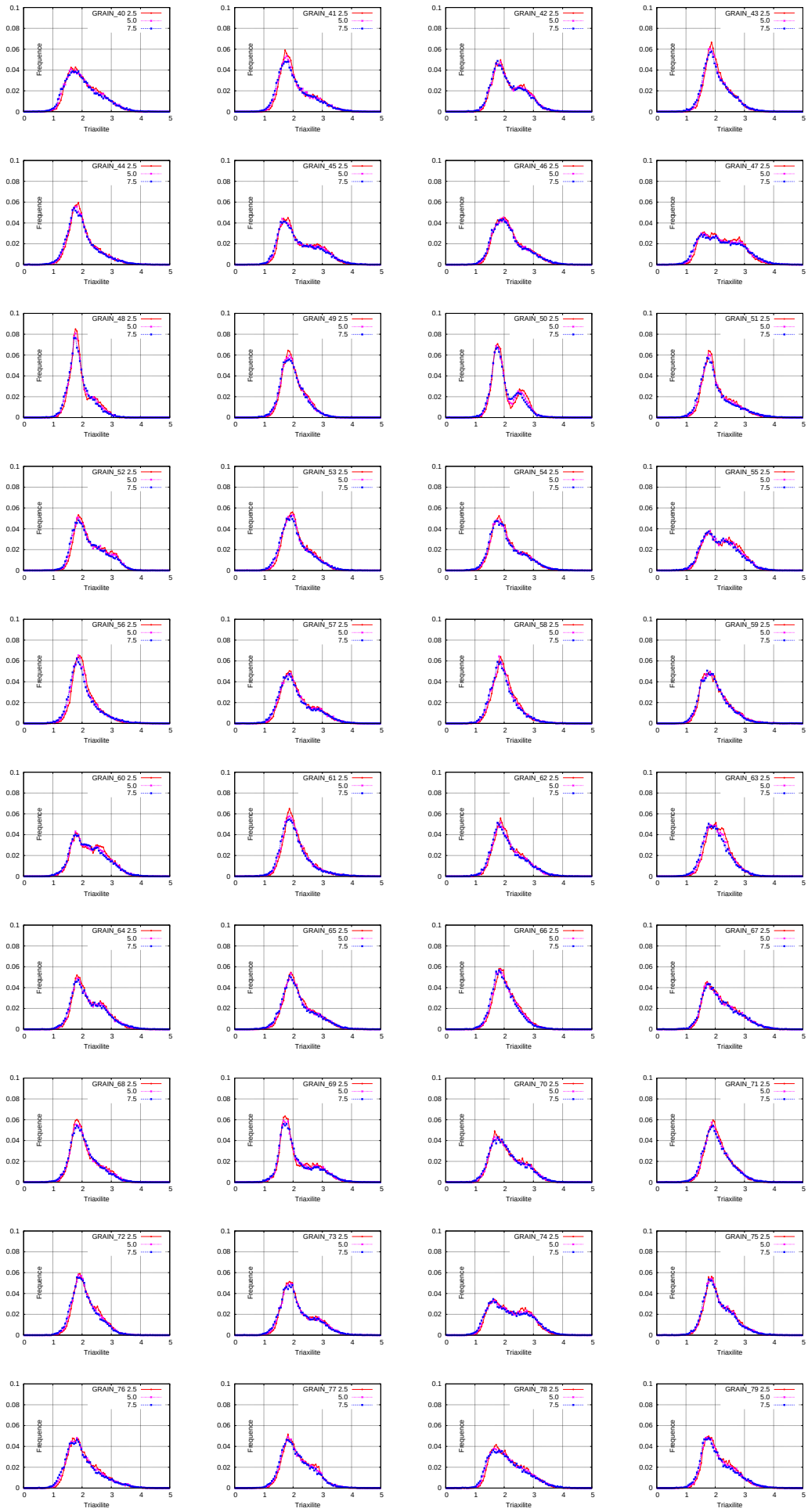


FIG. *A.32. Distribution de la triaxilité dans les GRAINS*

A.1.3 Matériaux non irradié à température −90°C

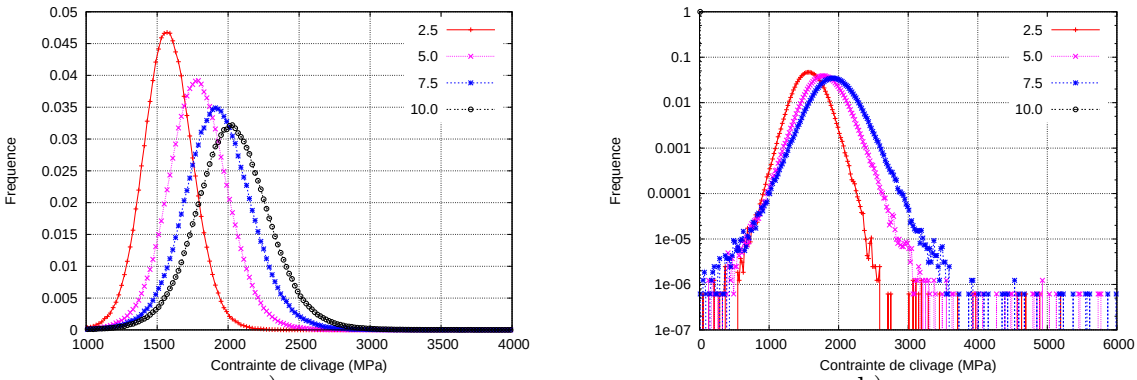


FIG. *A.33. Distribution de contrainte de clivage au 2.5%, 5.0%, 7.5% et 10.0% déformation équivalente*

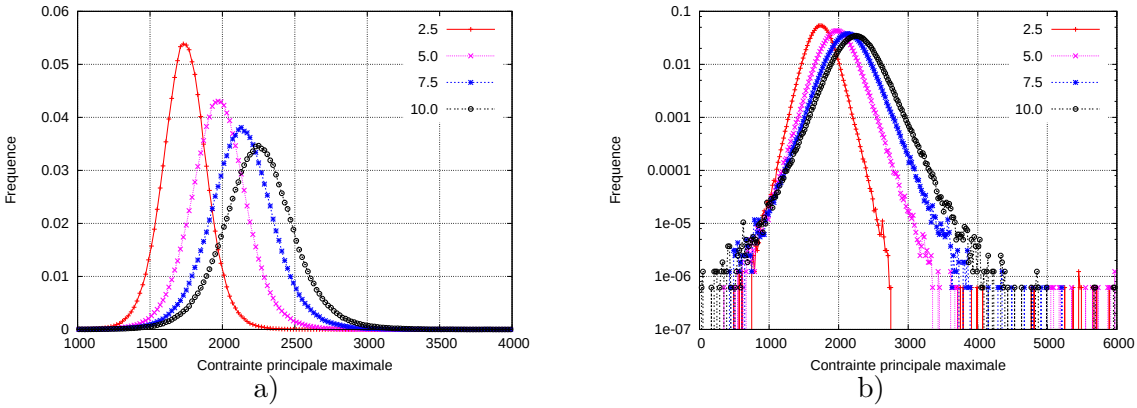


FIG. *A.34. Distribution de contrainte principale maximale au 2.5%, 5.0%, 7.5% et 10.0% déformation équivalente*

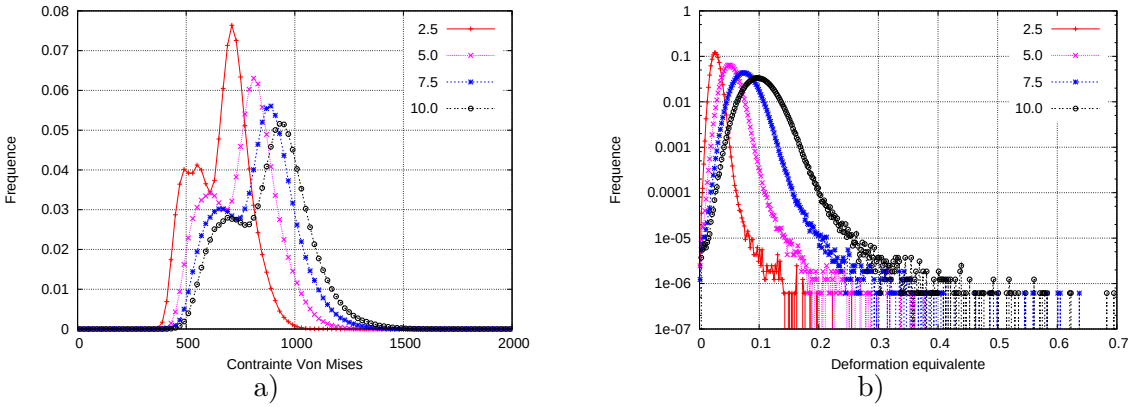
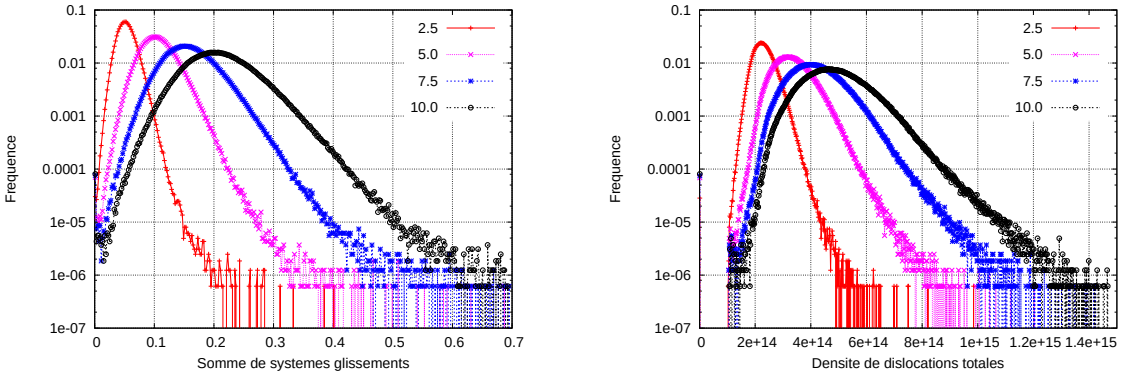


FIG. *A.35. Distribution de contrainte Von Mises a) et déformation équivalente b) au 2.5%, 5.0%, 7.5% et 10.0% déformation équivalente*



a) b)

FIG. *A.36. Distributions de la somme de systèmes glissement a) et la densité de dislocations totale b) au 2.5 %, 5.0%, 7.5% et 10.0% déformation équivalente*

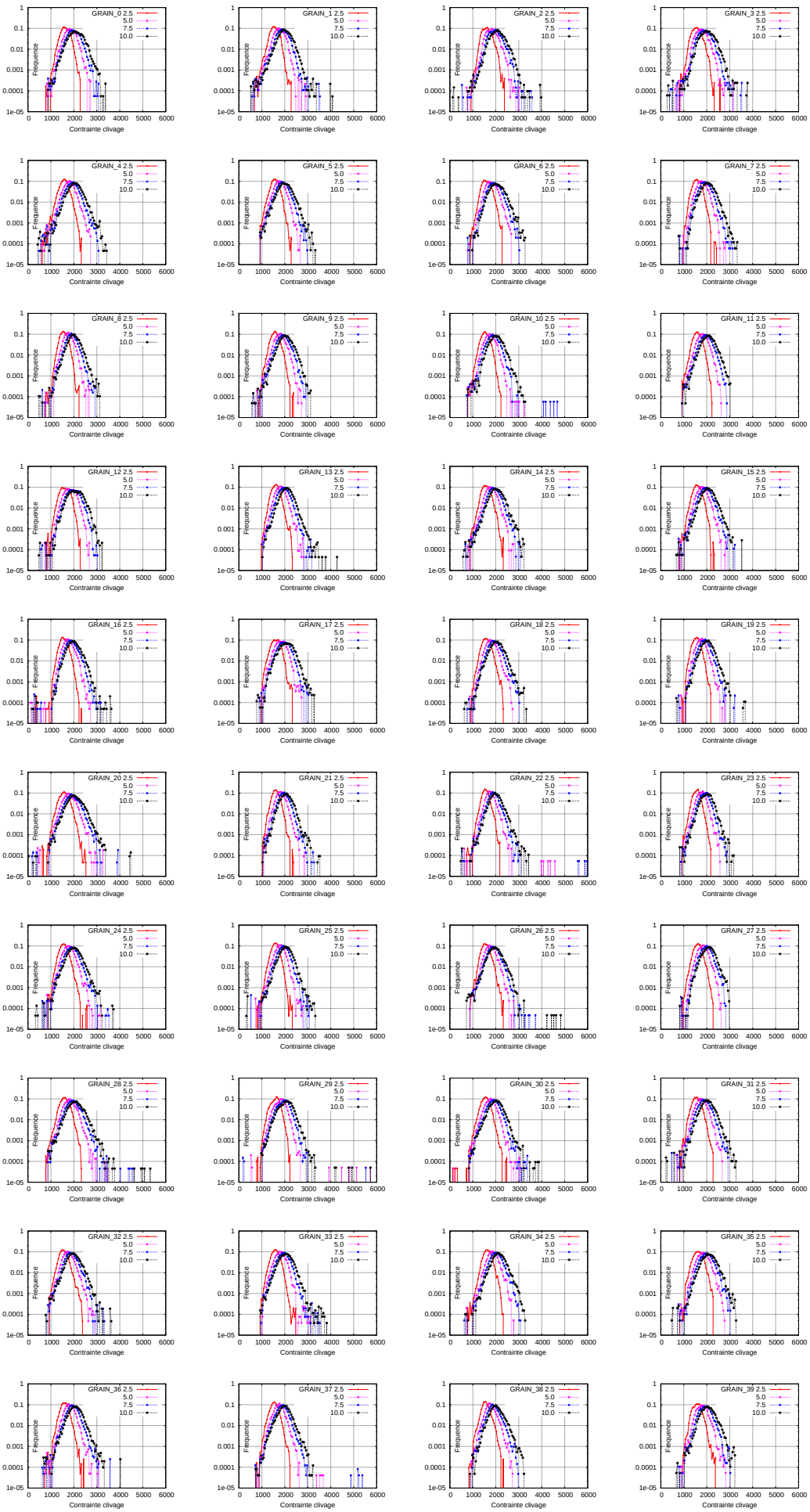


FIG. *A.37. Distribution de contrainte clivage dans les GRAINS (MPa)*

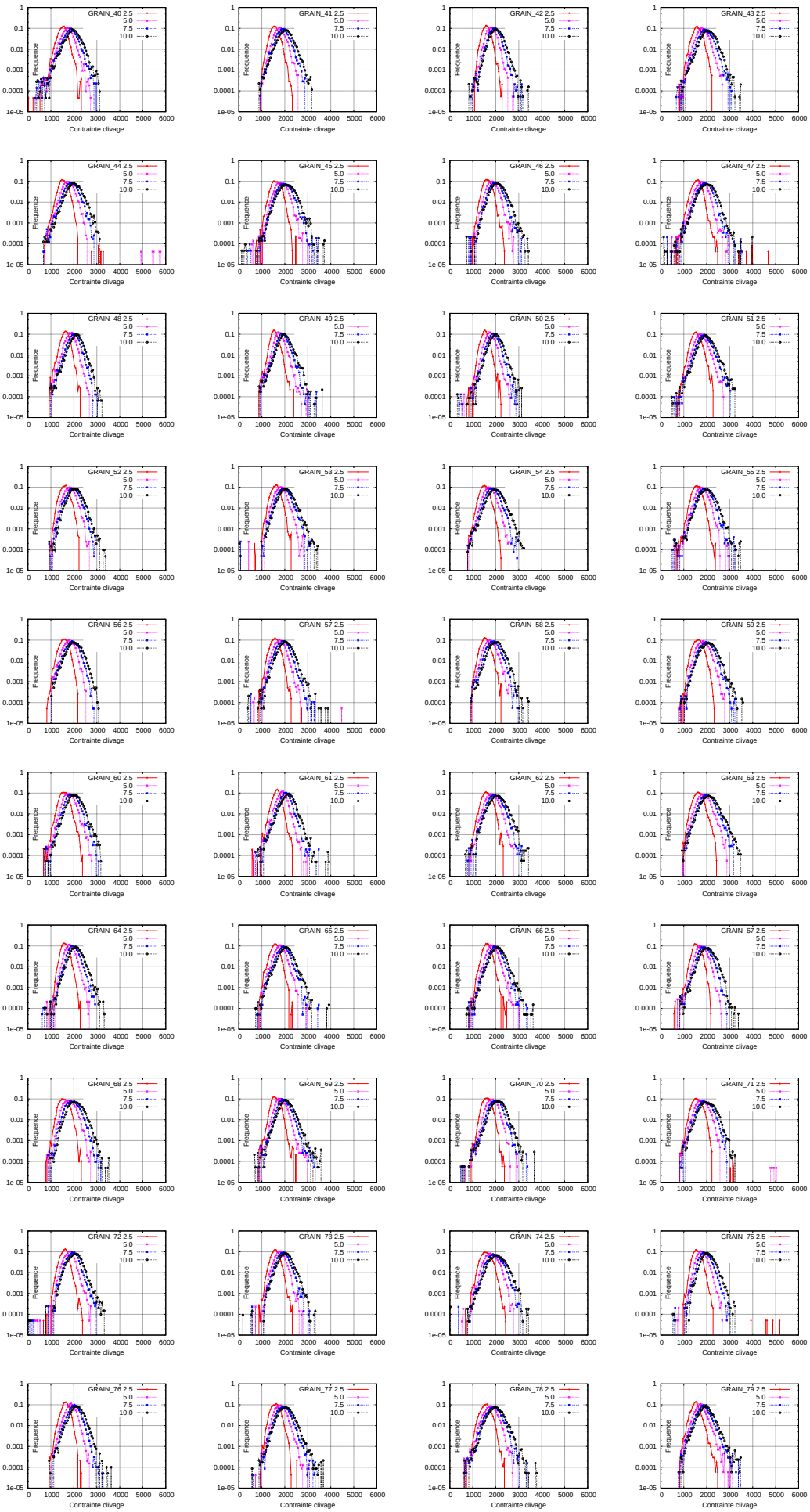


FIG. *A.38. Distribution de contrainte clivage dans les GRAINS (MPa)*

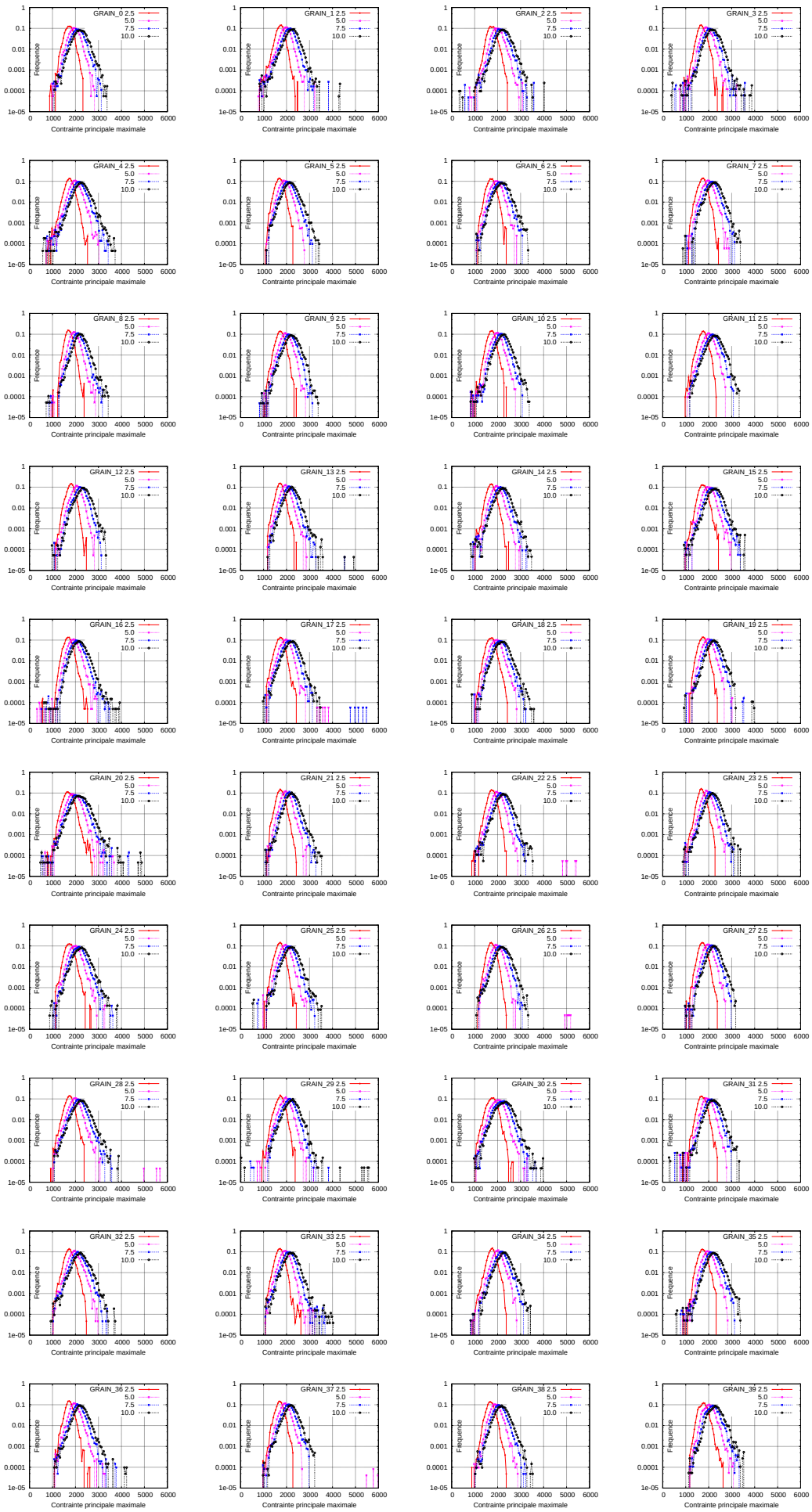


FIG. *A.39. Distribution de contrainte principale maximale dans les GRAINS (MPa)*

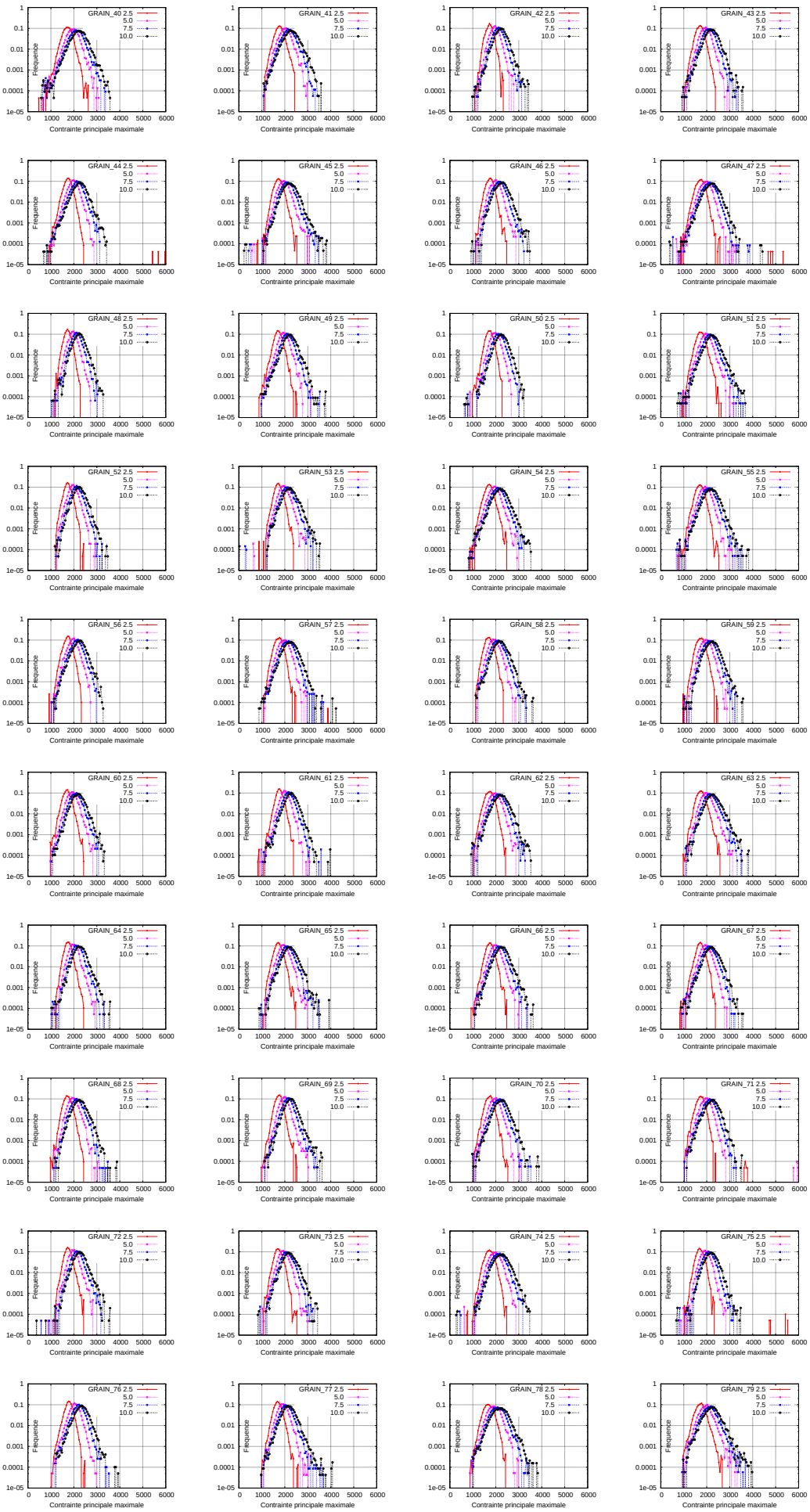


FIG. *A.40. Distribution de contrainte principale maximale dans les GRAINS (MPa)*

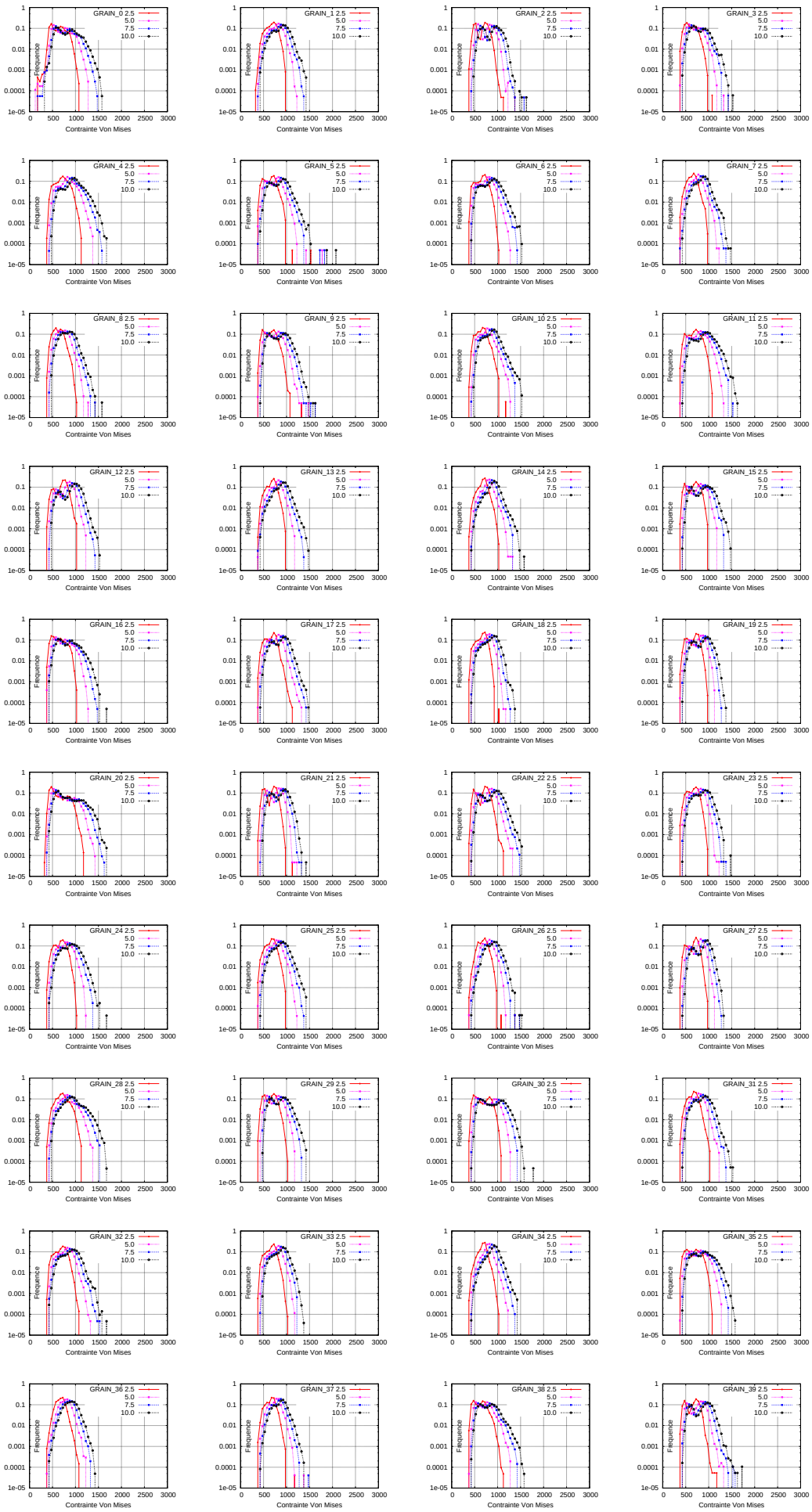


FIG. *A.41. Distribution de contrainte Von Mises dans les GRAINS (MPa)*

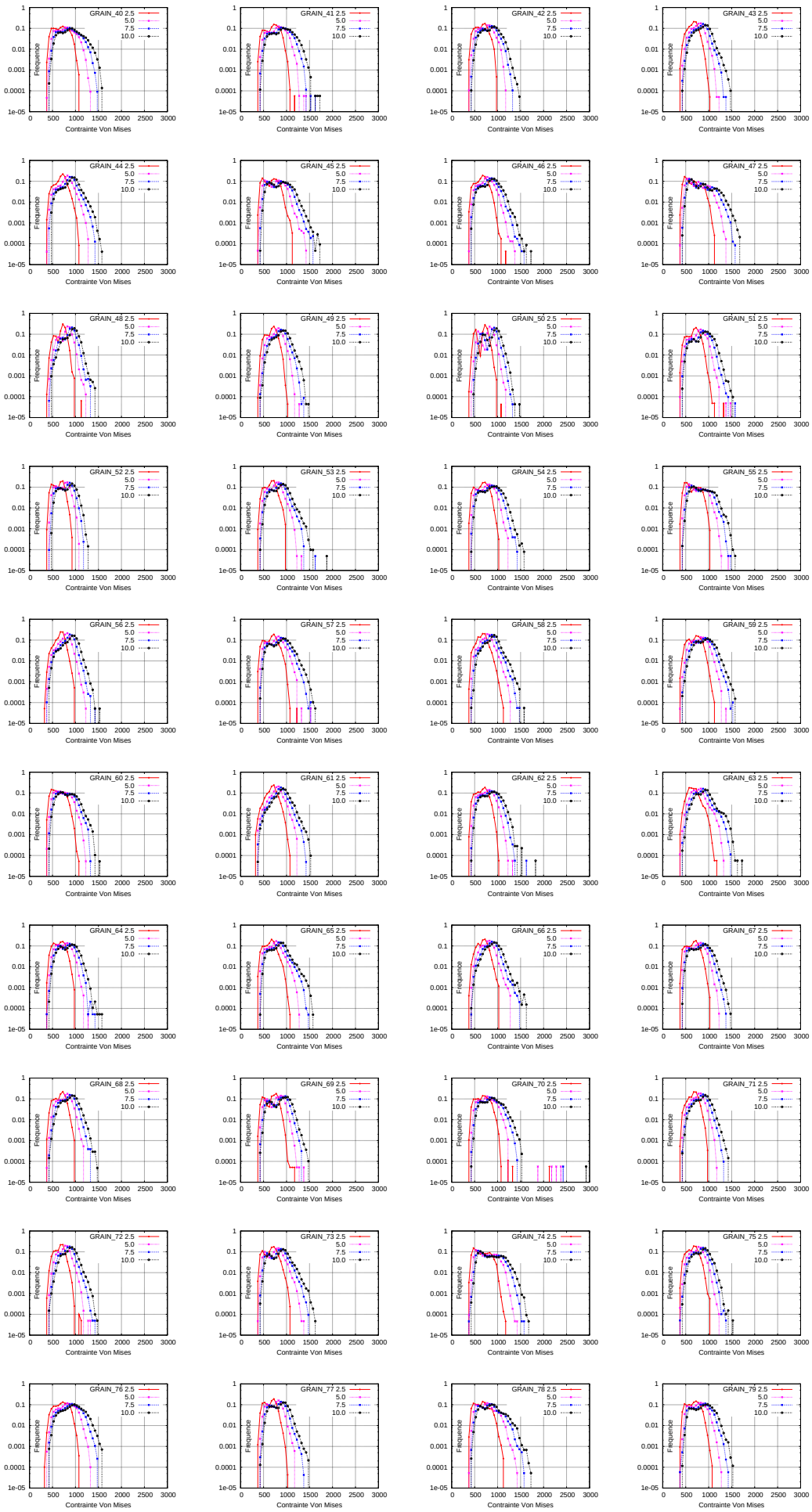


FIG. *A.42. Distribution de contrainte Von Mises dans les GRAINS (MPa)*

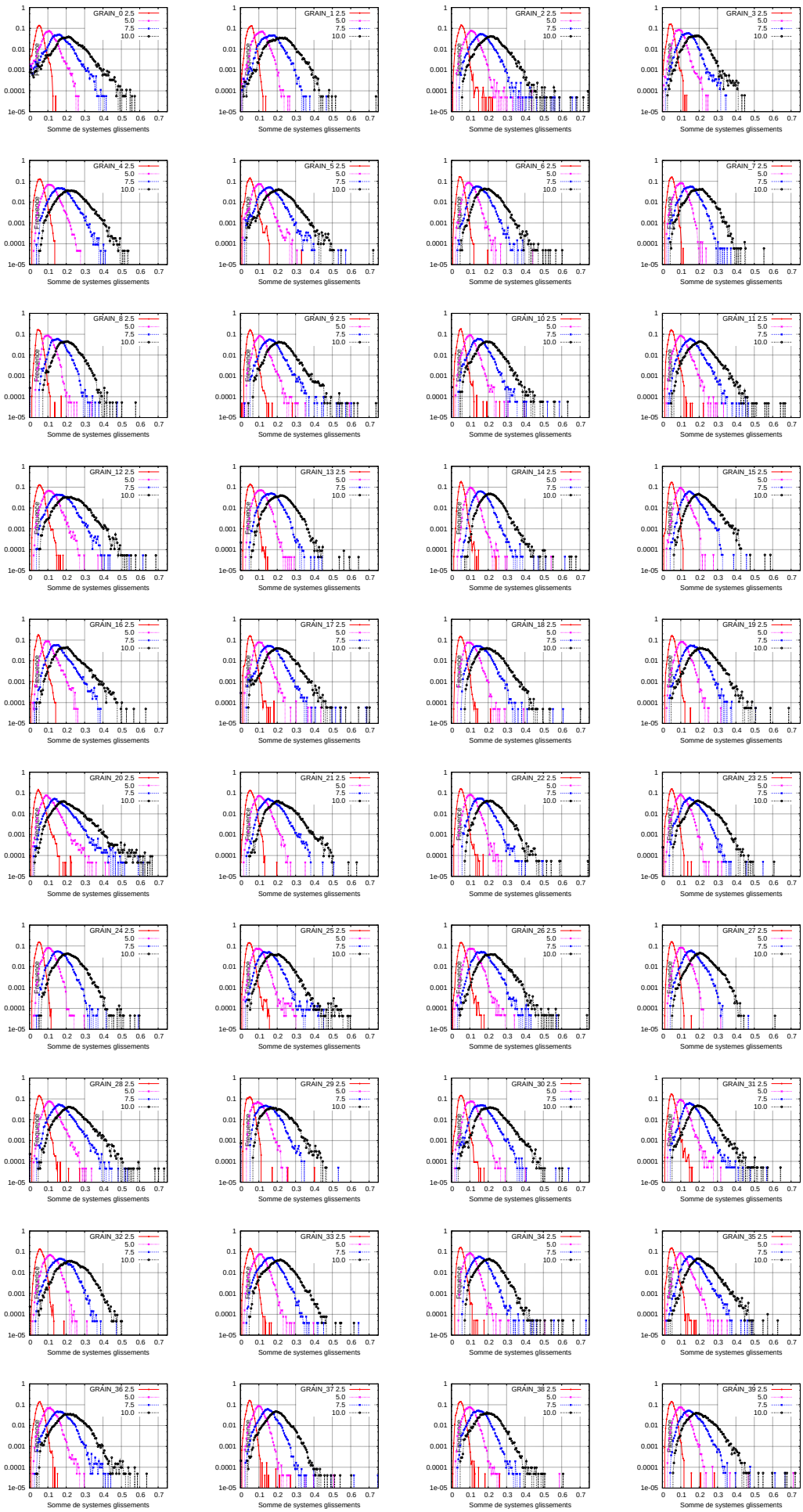


FIG. *A.43. Distribution de la somme de glissements des systèmes dans les GRAINS*

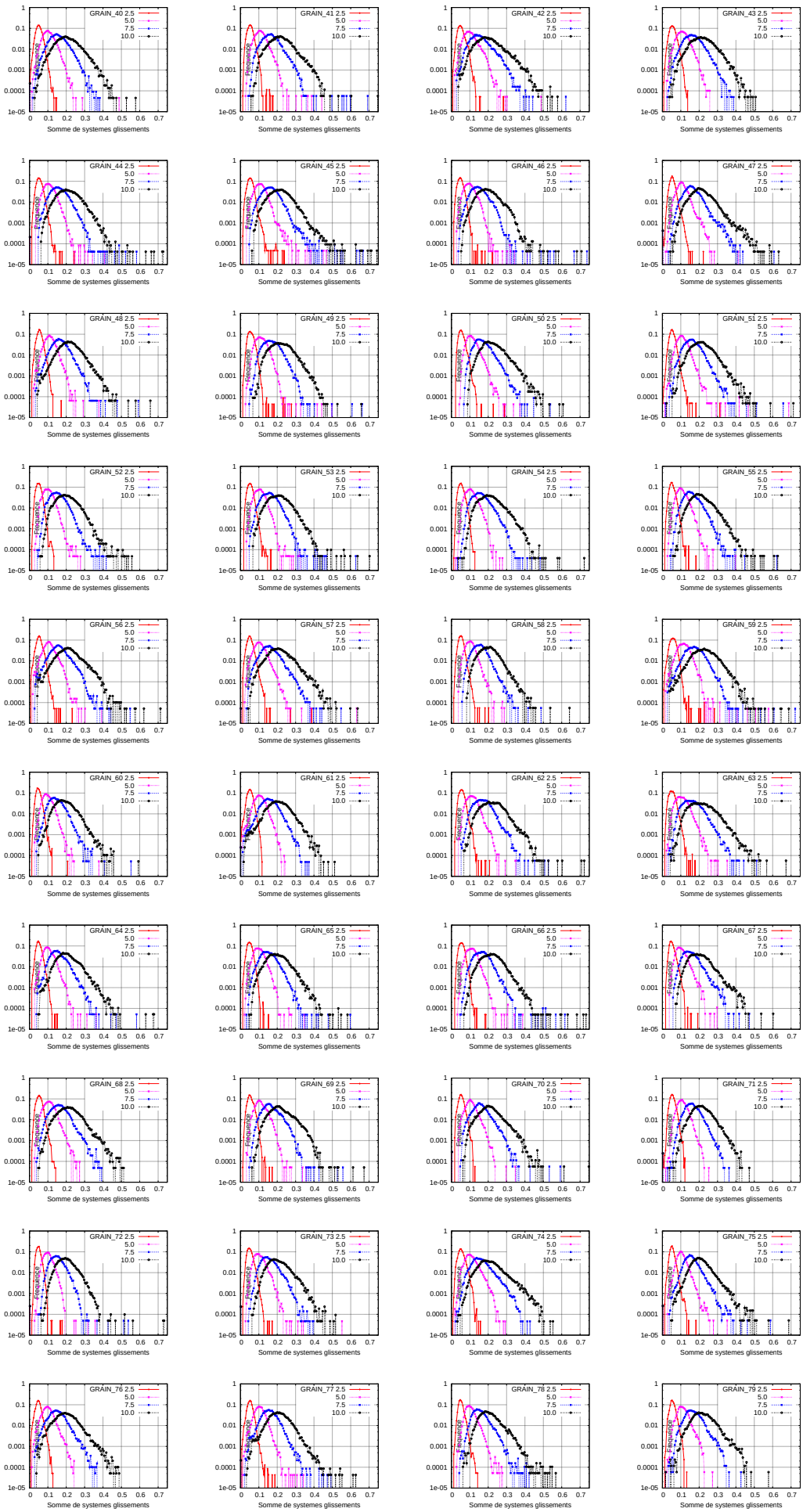


FIG. *A.44. Distribution de la somme de glissements des systèmes dans les GRAINS*

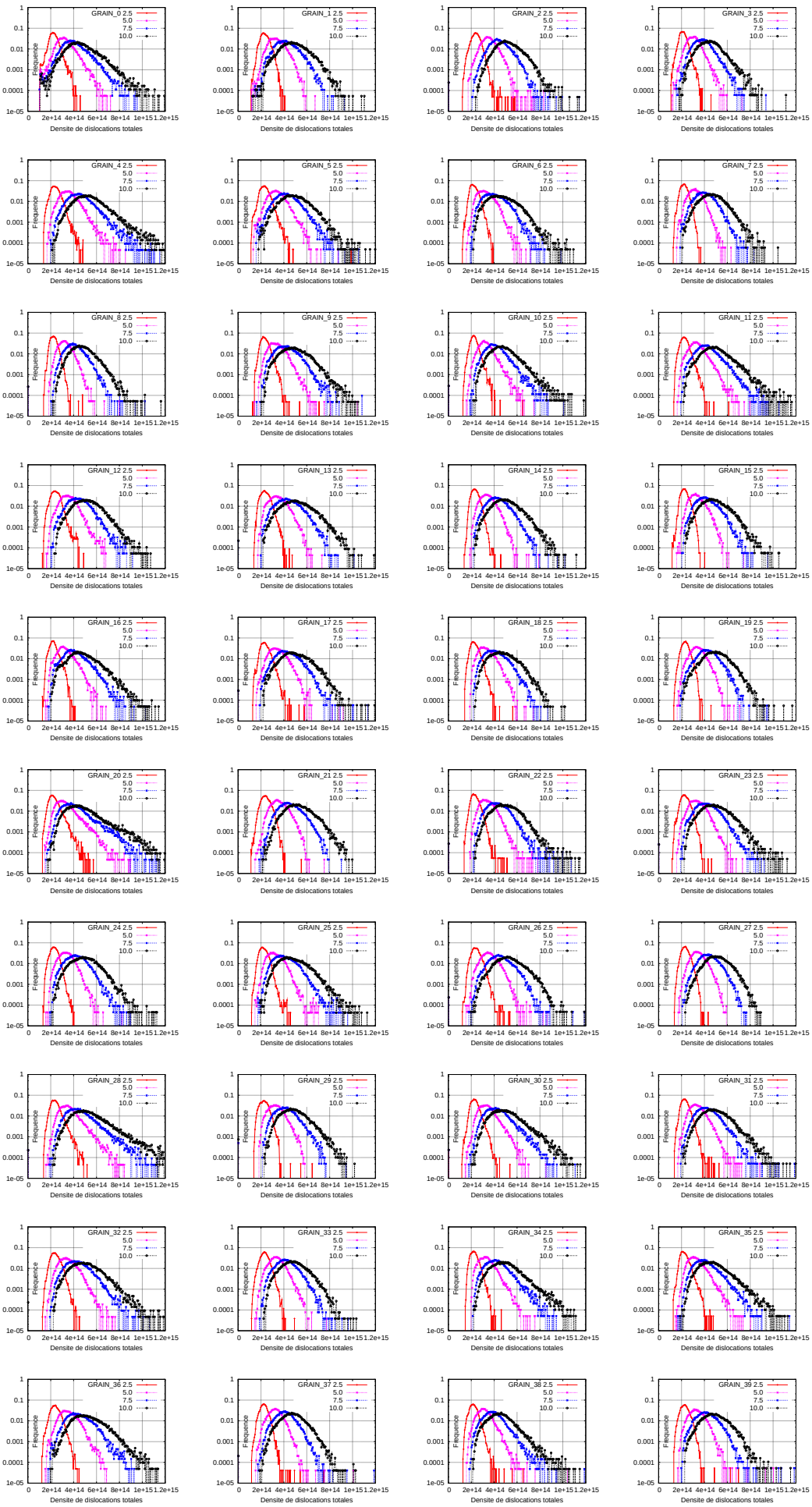


FIG. *A.45. Distribution de la densité de dislocations totales dans les GRAINS*

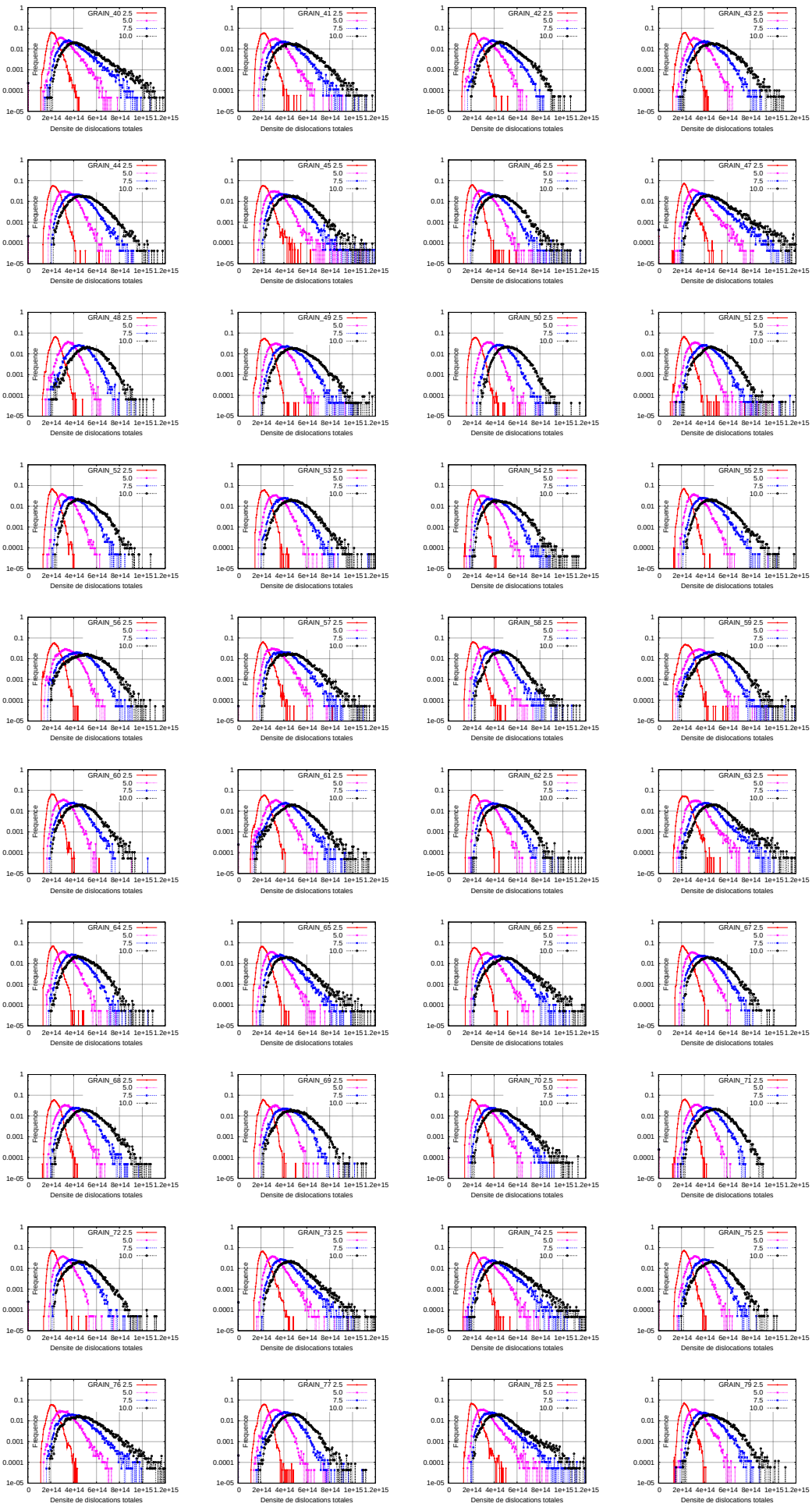


FIG. *A.46. Distribution de la densité de dislocations totales dans les GRAINS*

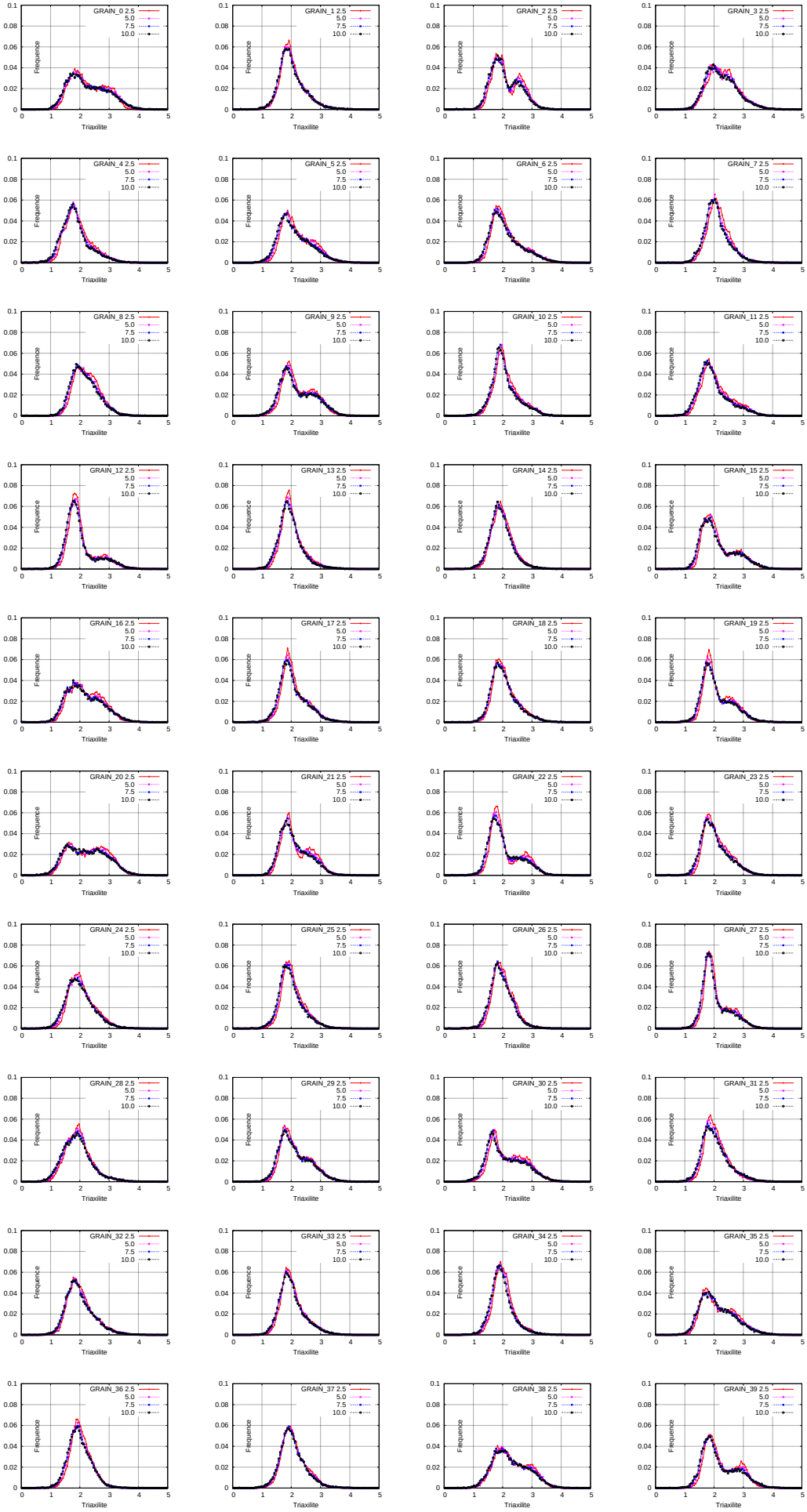


FIG. *A.47. Distribution de la triaxilité dans les GRAINS*

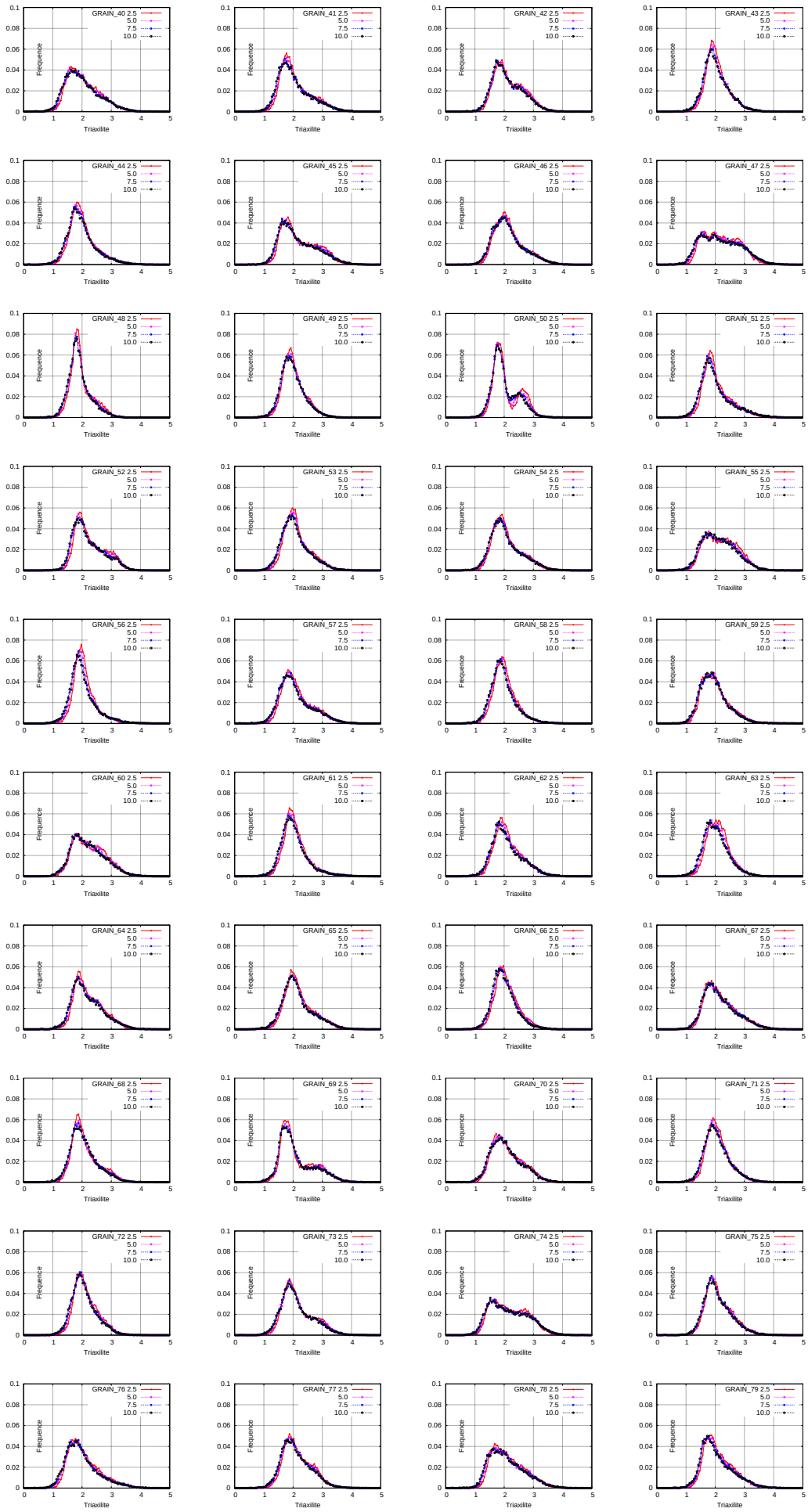


FIG. *A.48. Distribution de la triaxilité dans les GRAINS*

A.1.4 Matériaux non irradié à température −196°C

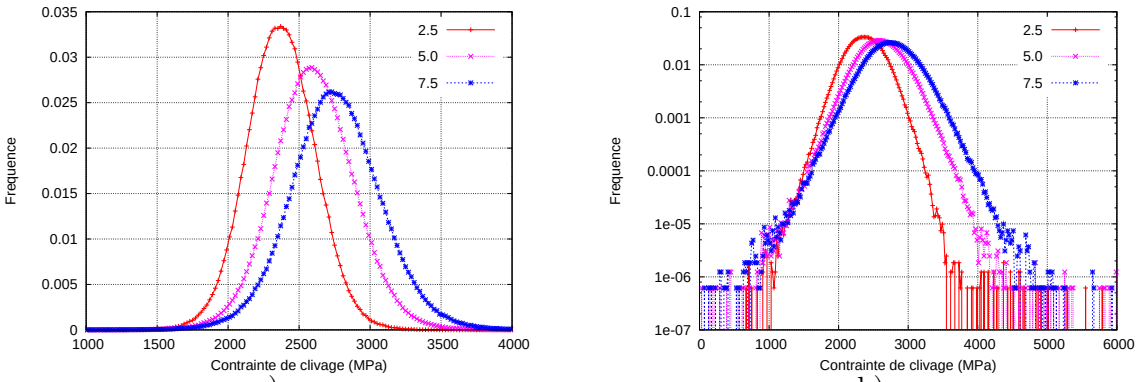


FIG. *A.49. Distribution de contrainte de clivage au 2.5%, 5.0%, 7.5% déformation équivalente*

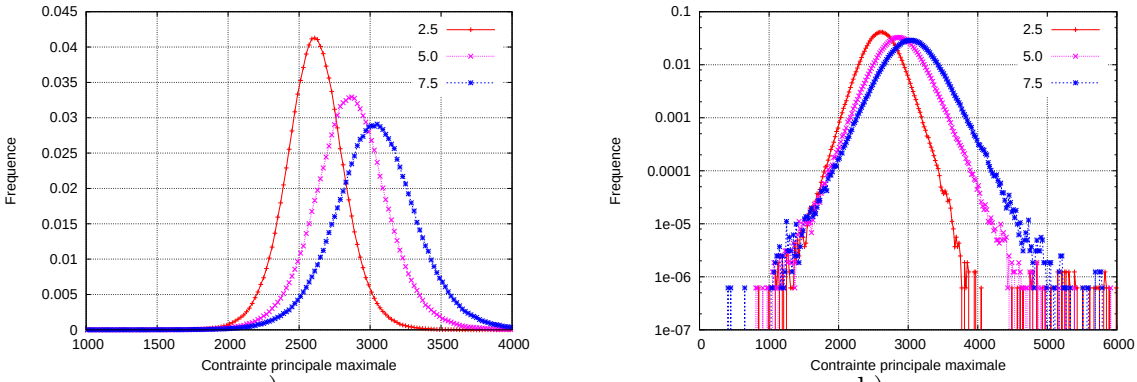


FIG. *A.50. Distribution de contrainte principale maximale au 2.5%, 5.0%, 7.5% déformation équivalente*

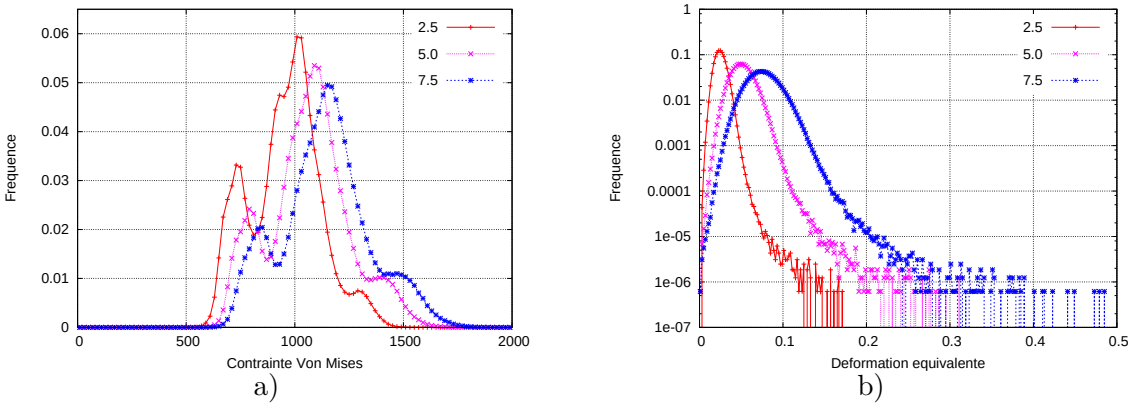
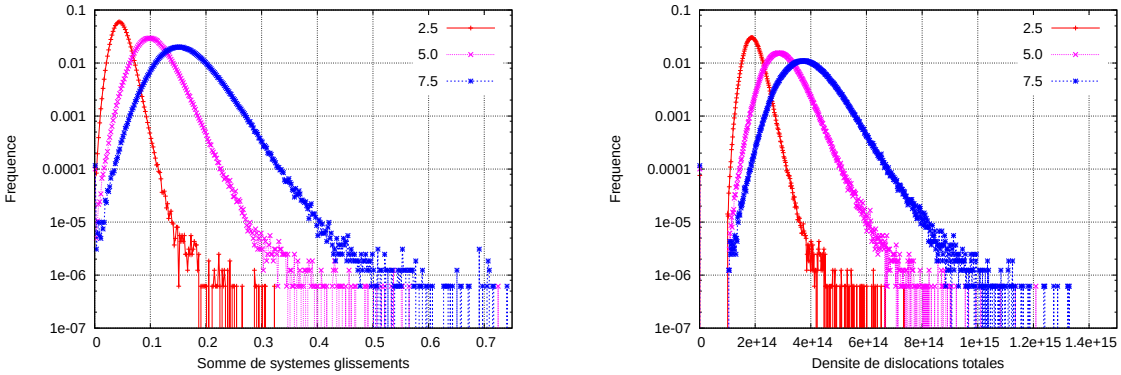


FIG. *A.51. Distribution de contrainte Von Mises a) et déformation équivalente b) au 2.5%, 5.0%, 7.5% déformation équivalente*



a) b)

FIG. *A.52. Distributions de la somme de systèmes glissement a) et la densité de dislocations totale b) au 2.5 %, 5.0%, 7.5% déformation équivalente*

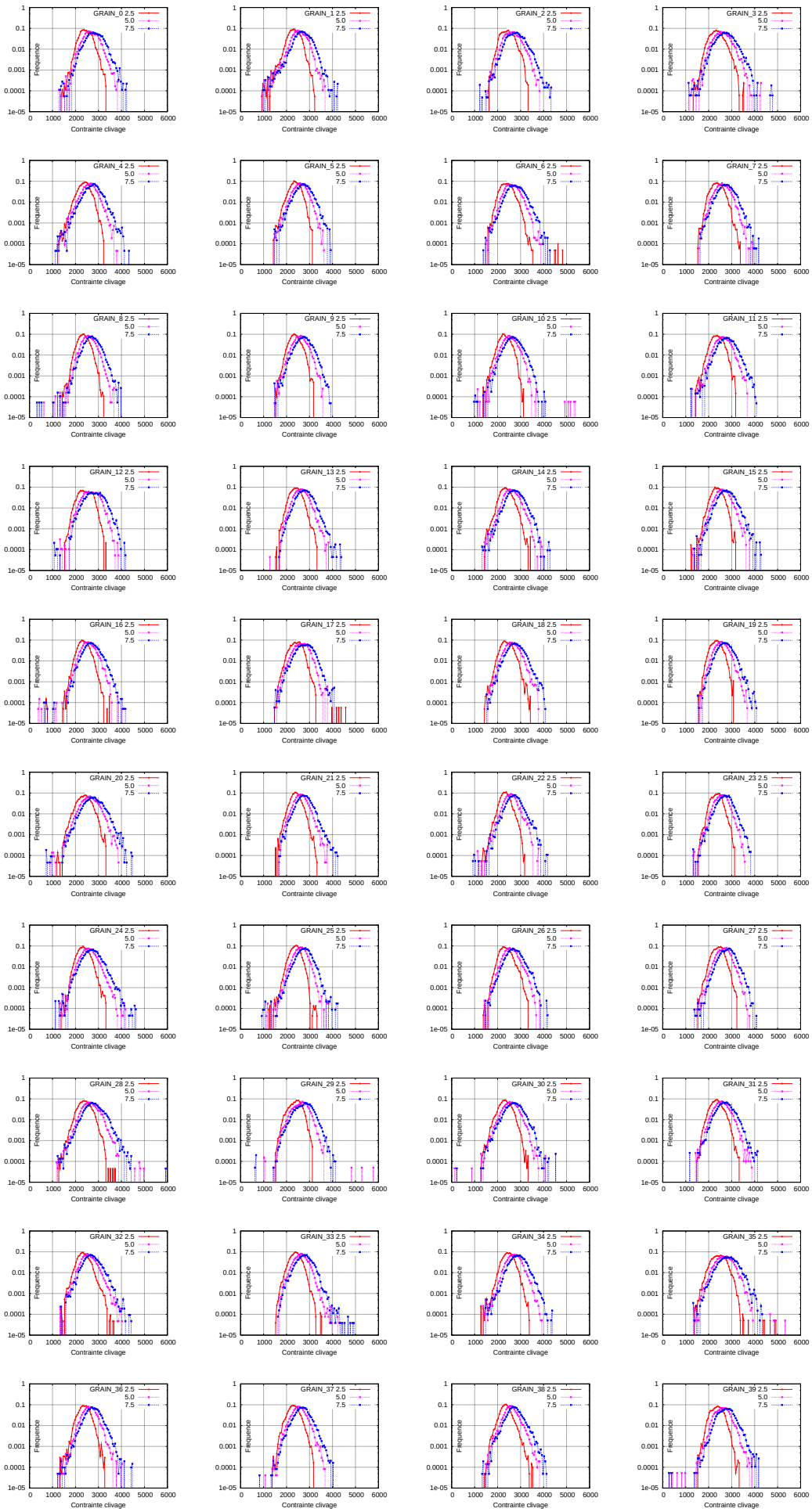


FIG. *A.53. Distribution de contrainte clivage dans les GRAINS (MPa)*

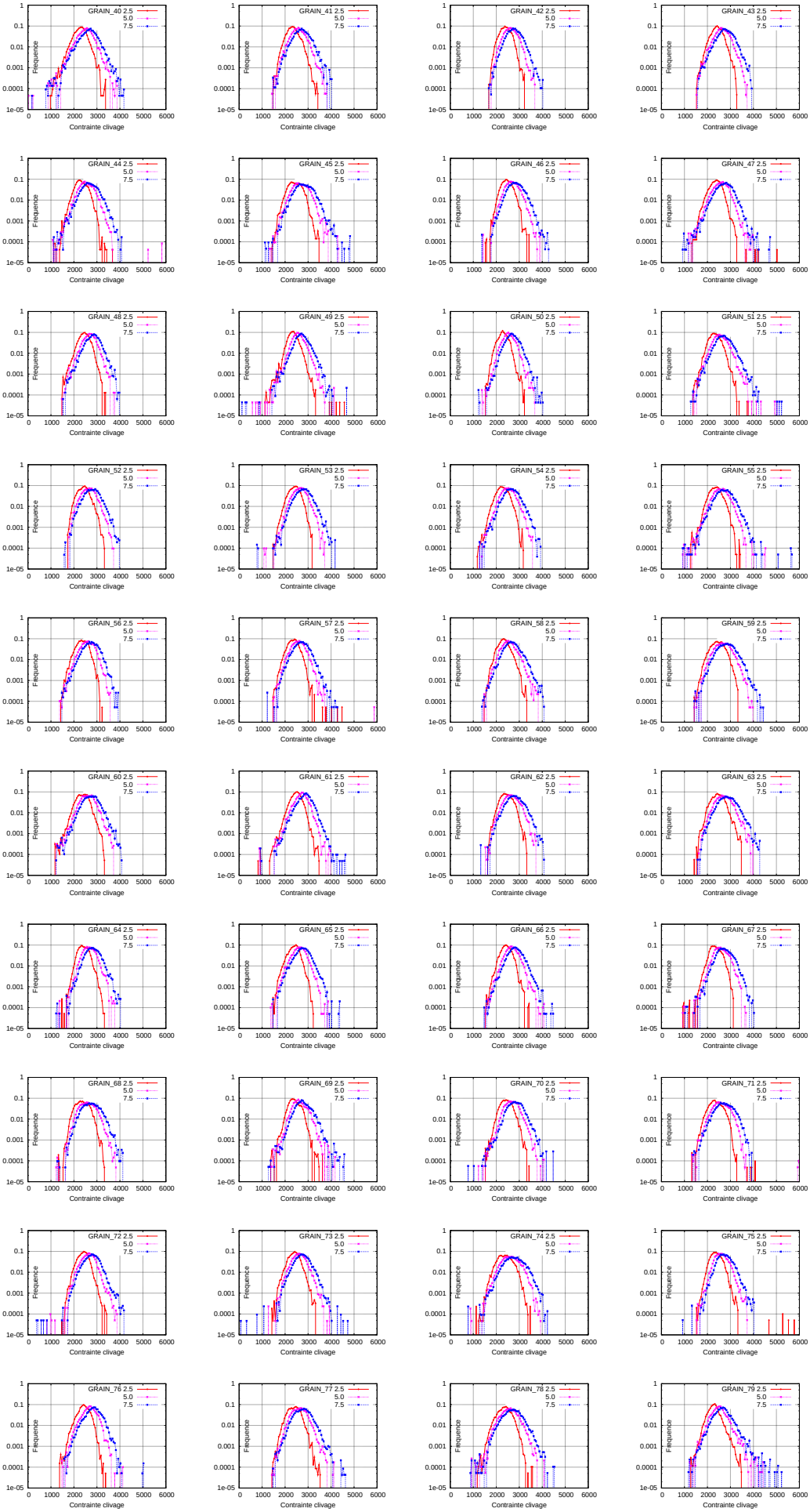


FIG. *A.54. Distribution de contrainte clivage dans les GRAINS (MPa)*

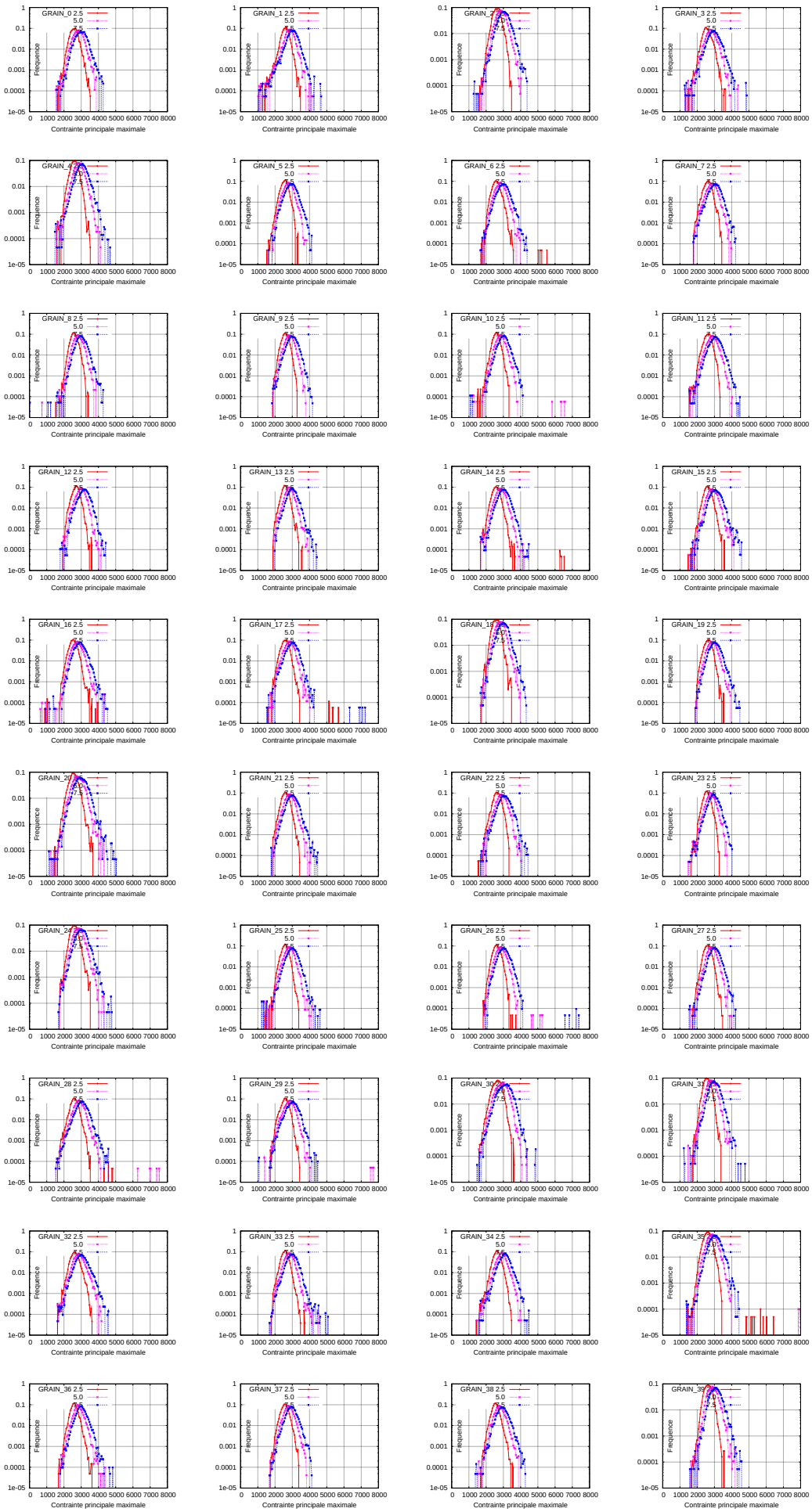


FIG. *A.55. Distribution de contrainte principale maximale dans les GRAINS (MPa)*

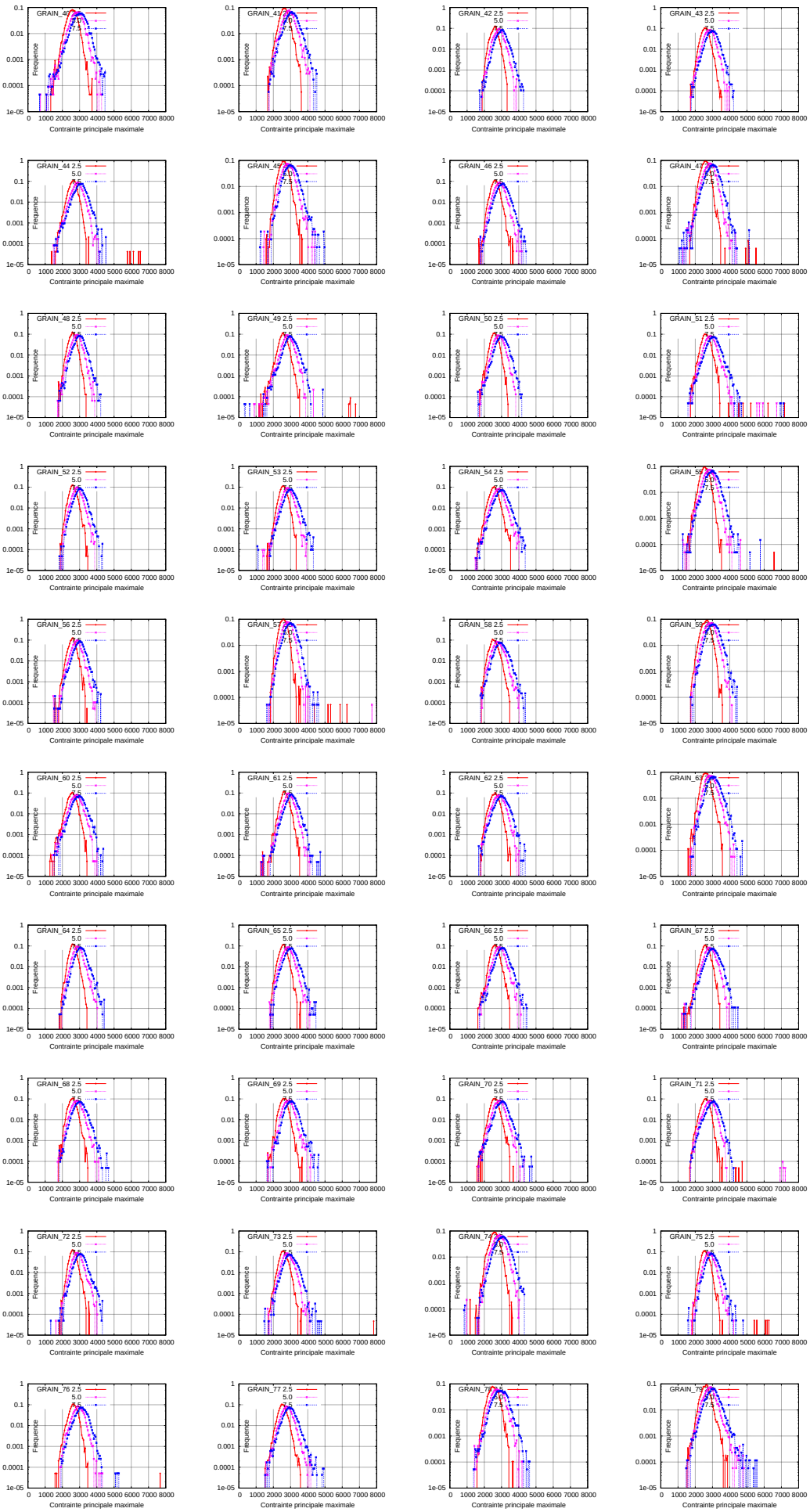


FIG. *A.56. Distribution de contrainte principale maximale dans les GRAINS (MPa)*

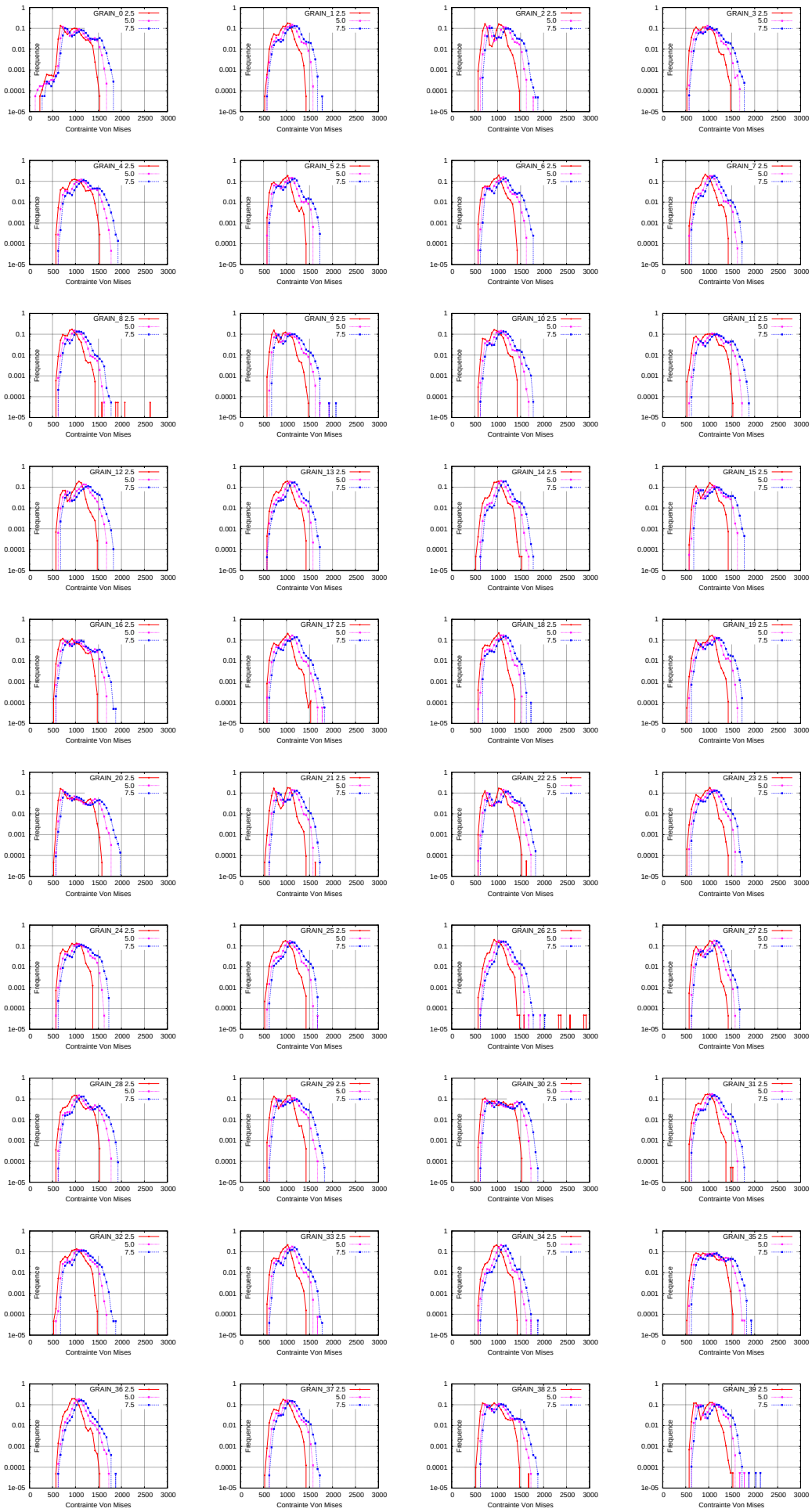


FIG. *A.57. Distribution de contrainte Von Mises dans les GRAINS (MPa)*

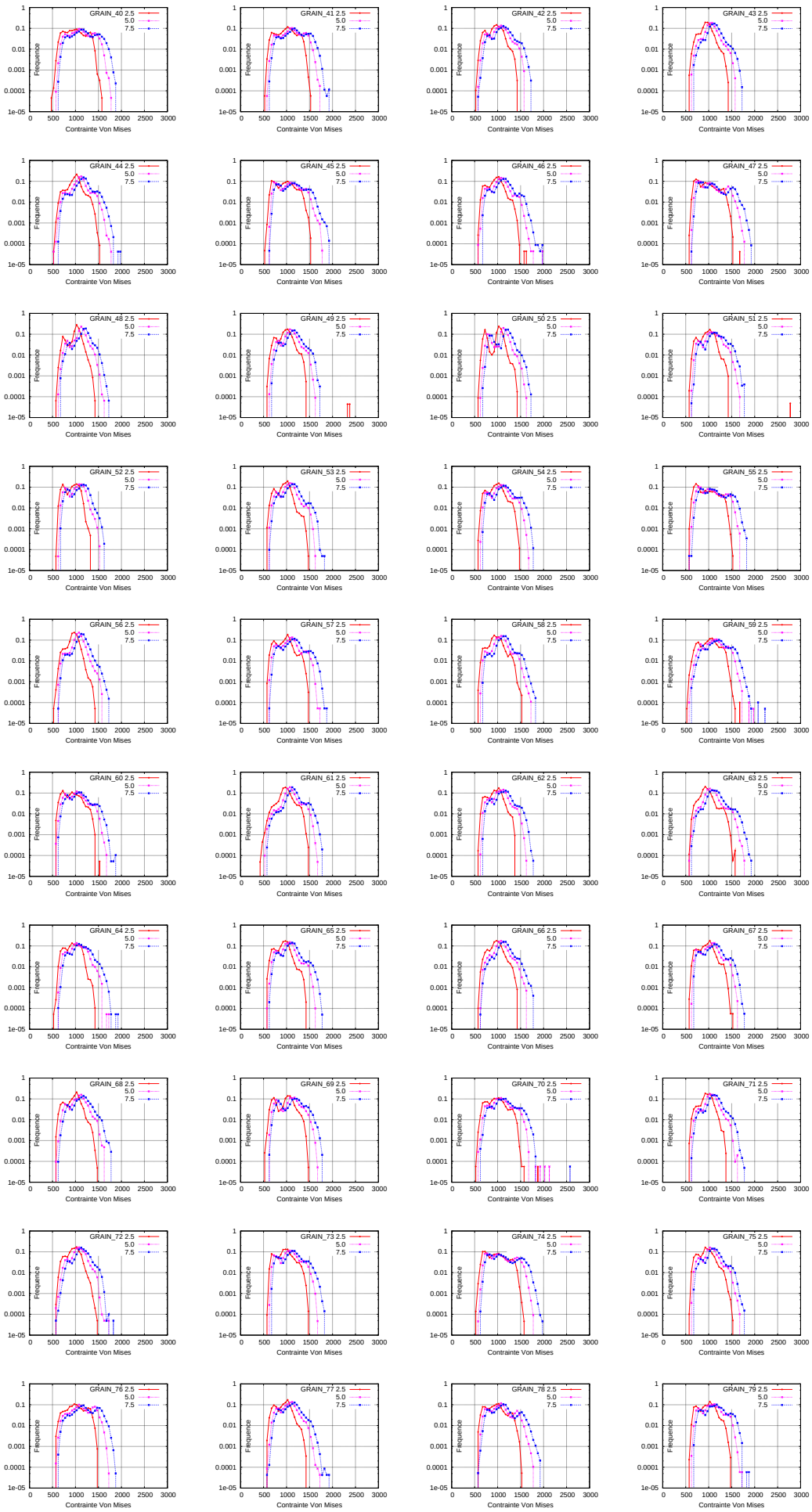


FIG. *A.58. Distribution de contrainte Von Mises dans les GRAINS (MPa)*

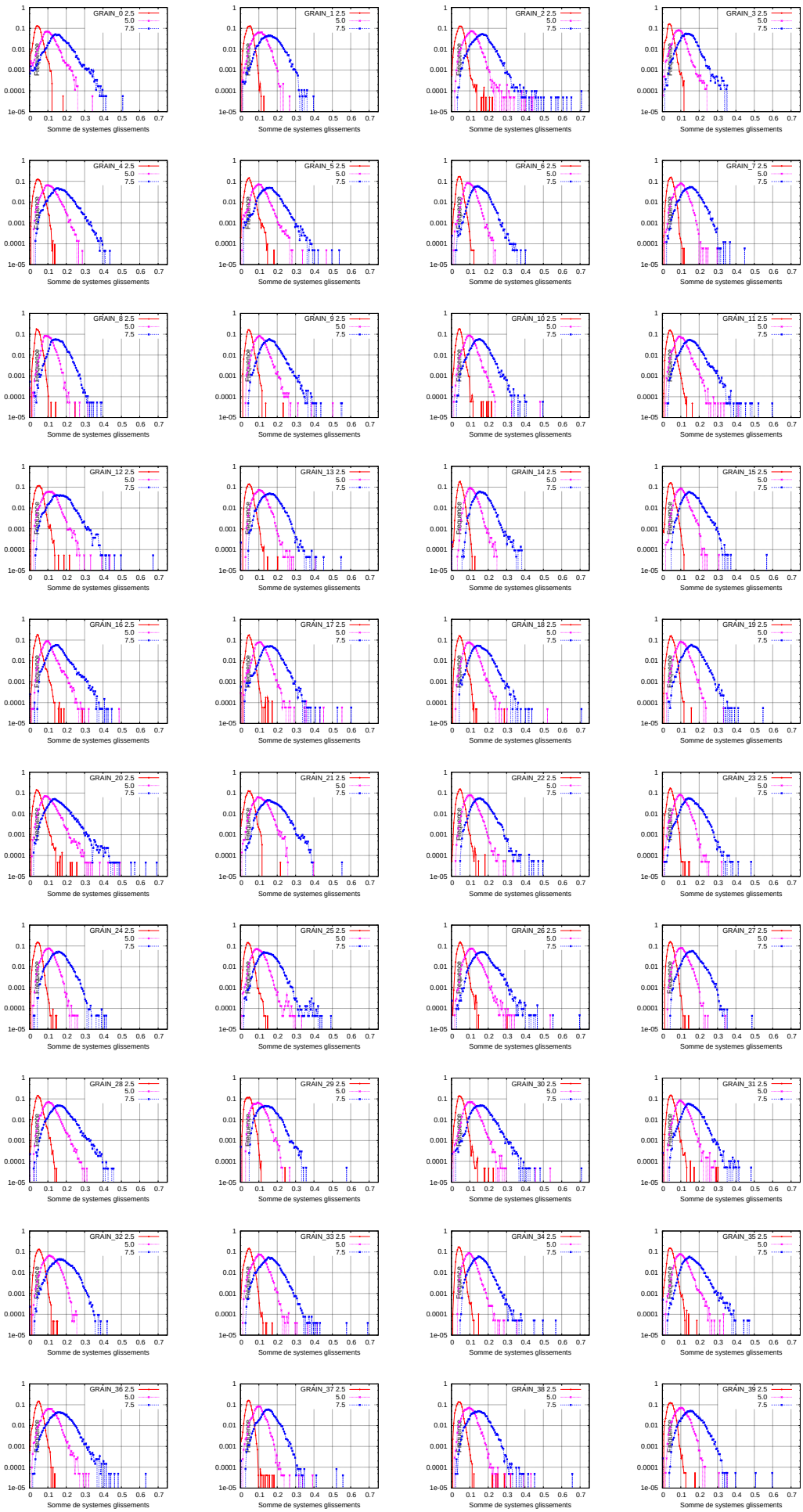


FIG. *A.59. Distribution de la somme de glissements des systèmes dans les GRAINS*

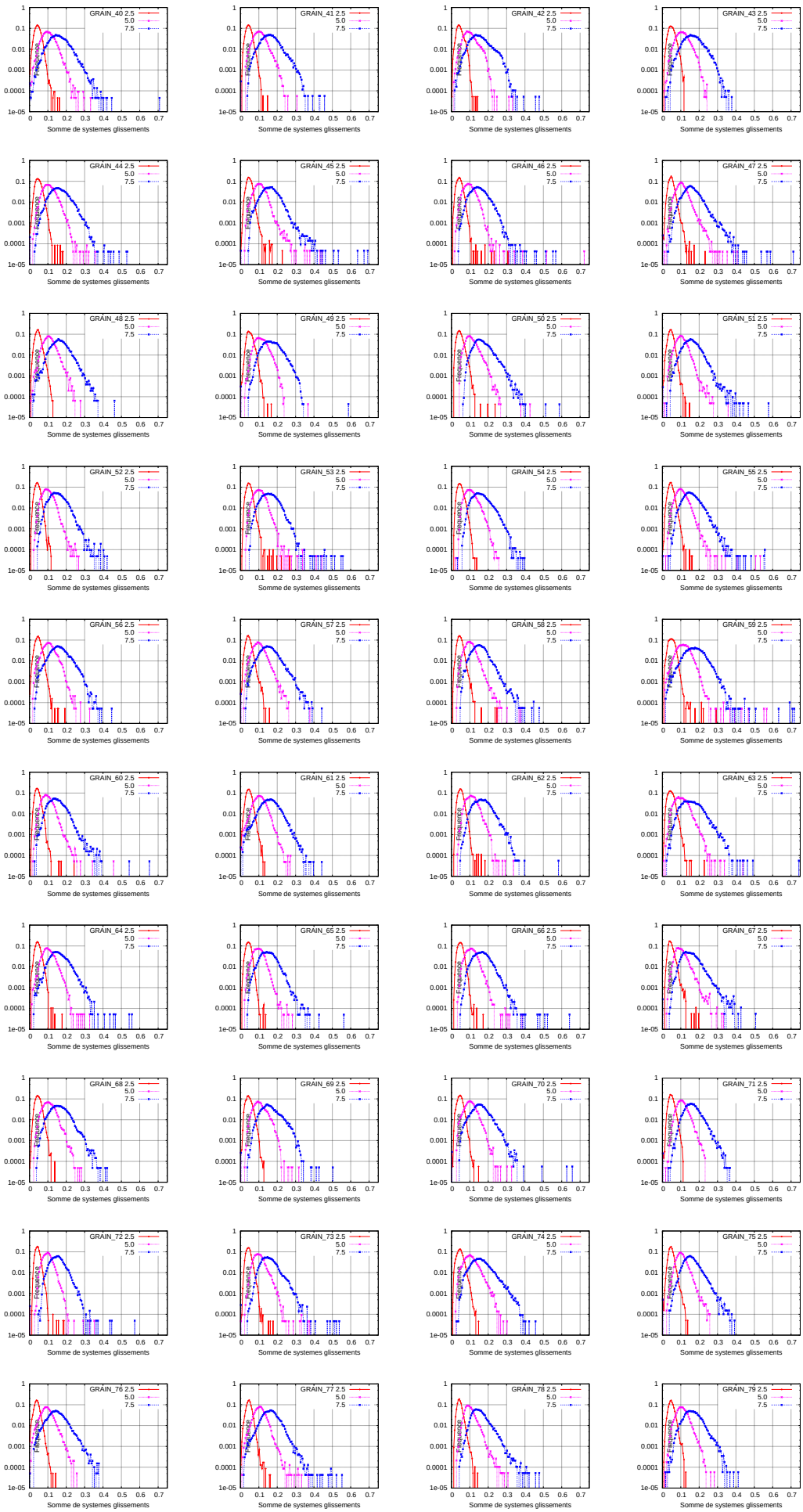


FIG. *A.60. Distribution de la somme de glissements des systèmes dans les GRAINS*

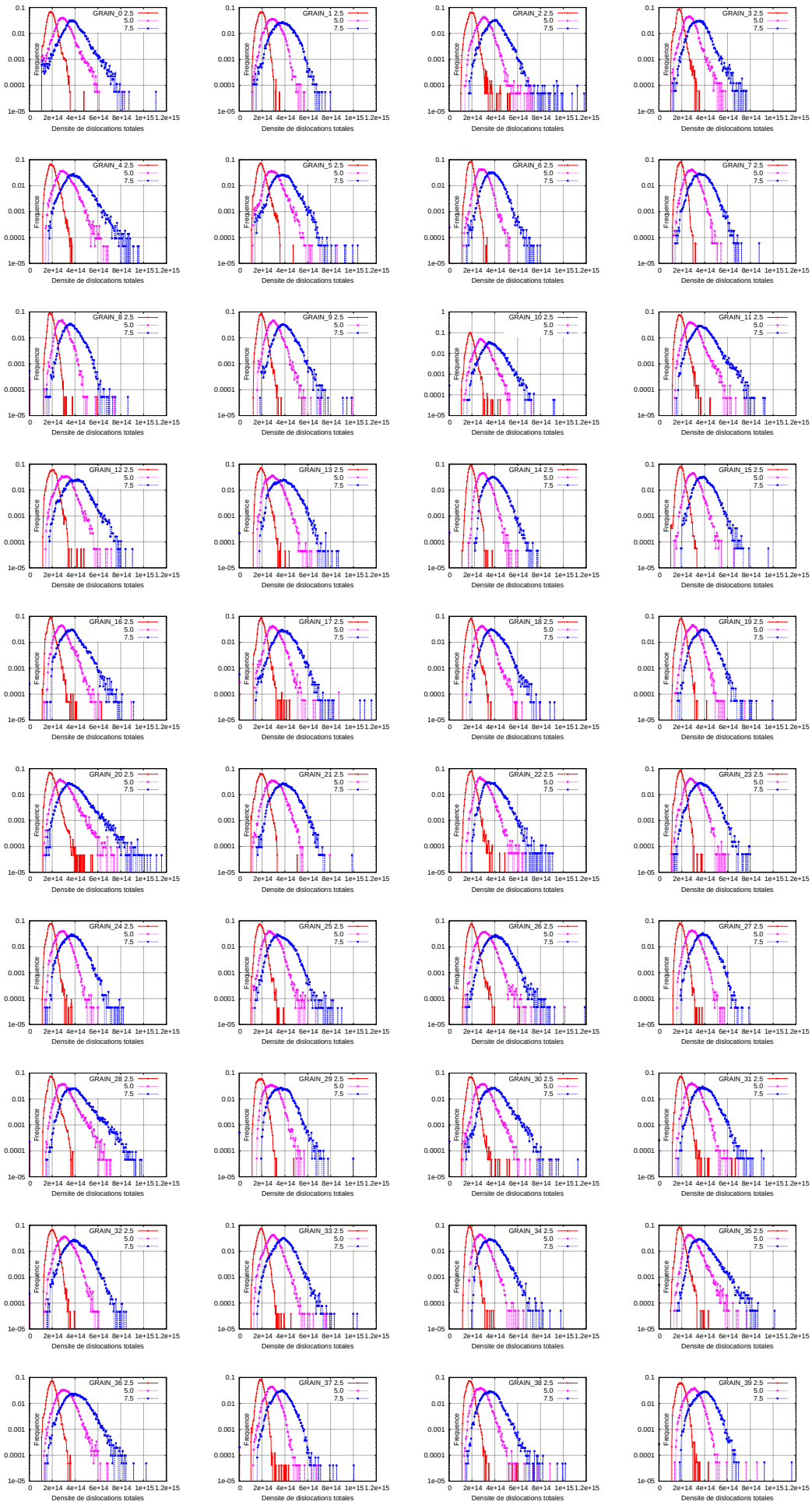


FIG. *A.61. Distribution de la densité de dislocations totales dans les GRAINS*

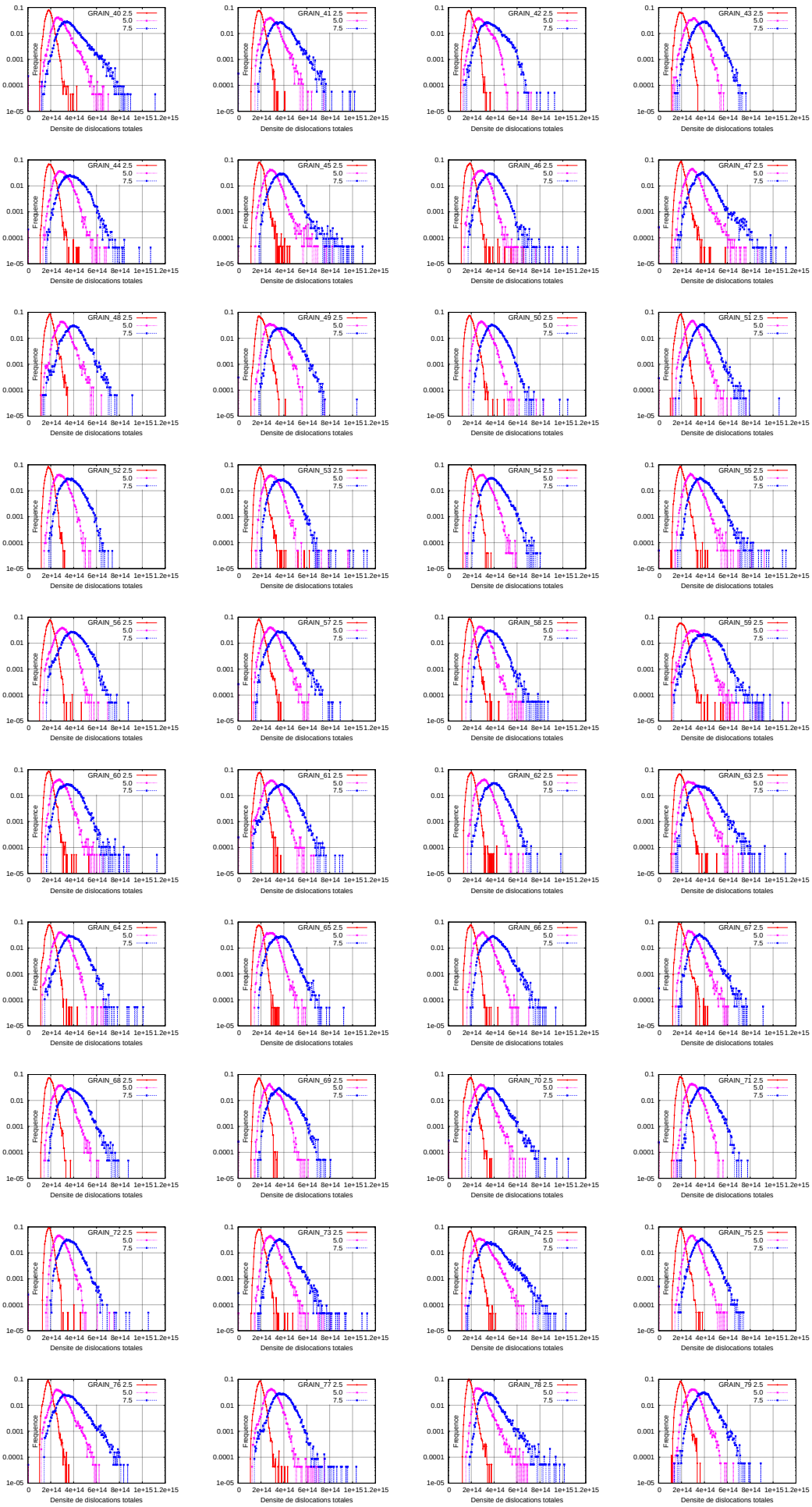


FIG. *A.62. Distribution de la densité de dislocations totales dans les GRAINS*

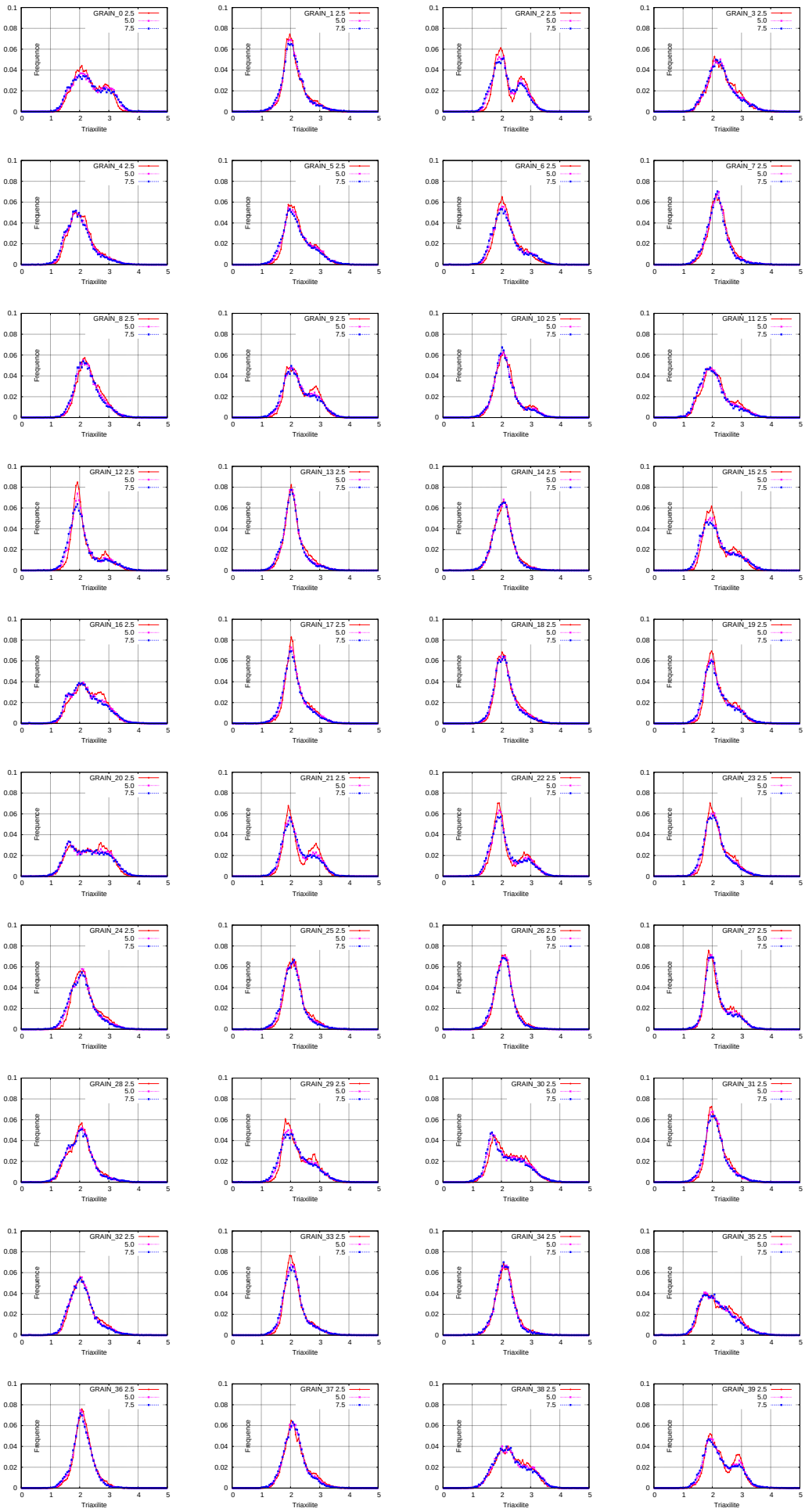


FIG. *A.63. Distribution de la triaxilité dans les GRAINS*

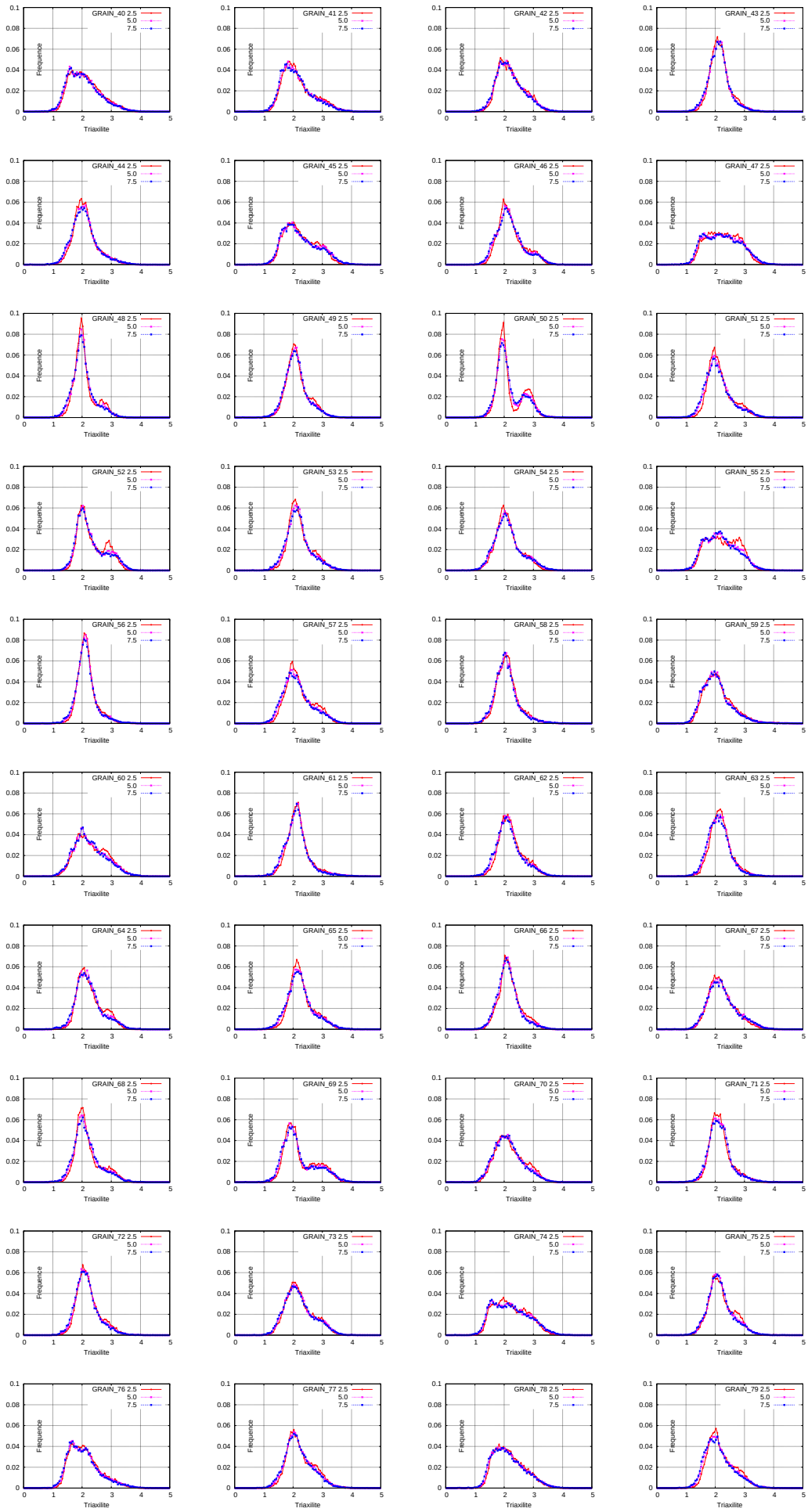


FIG. *A.64. Distribution de la triaxilité dans les GRAINS*

A.2 Résultats des matériaux irradiés

A.2.1 Matériaux irradié à température 25°C

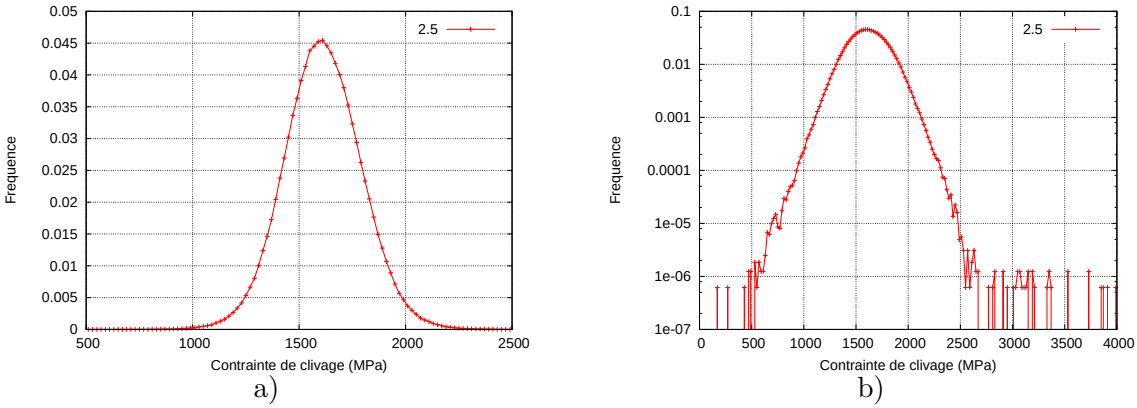


FIG. *A.65. Distribution de contrainte de clivage au 2.5% déformation équivalente*

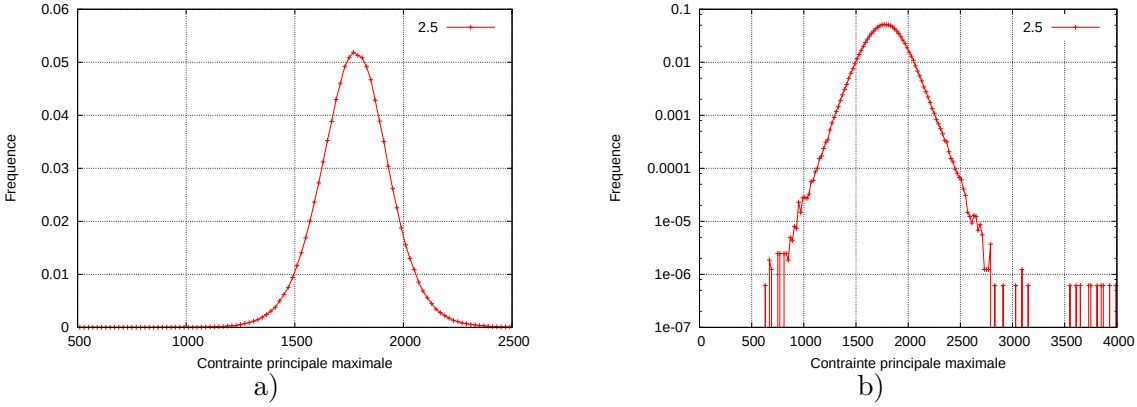


FIG. *A.66. Distribution de contrainte principale maximale au 2.5% déformation équivalente*

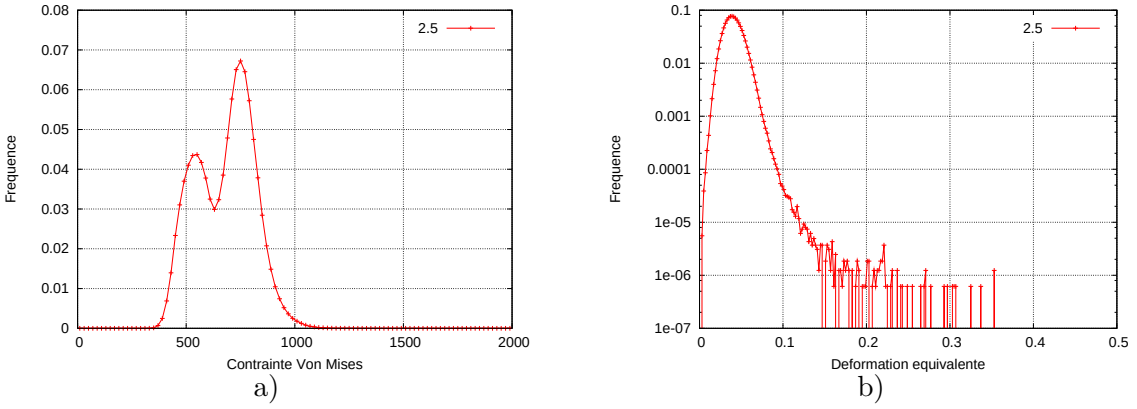
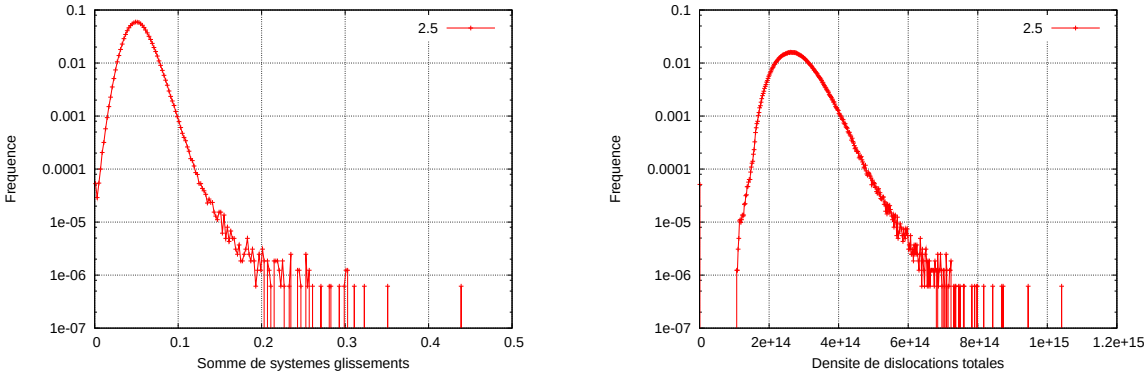


FIG. *A.67. Distribution de contrainte Von Mises a) et déformation équivalente b) au 2.5% déformation équivalente*



a) b)

FIG. *A.68. Distributions de la somme de systèmes glissement a) et la densité de dislocations totale b) au 2.5 % déformation équivalente*

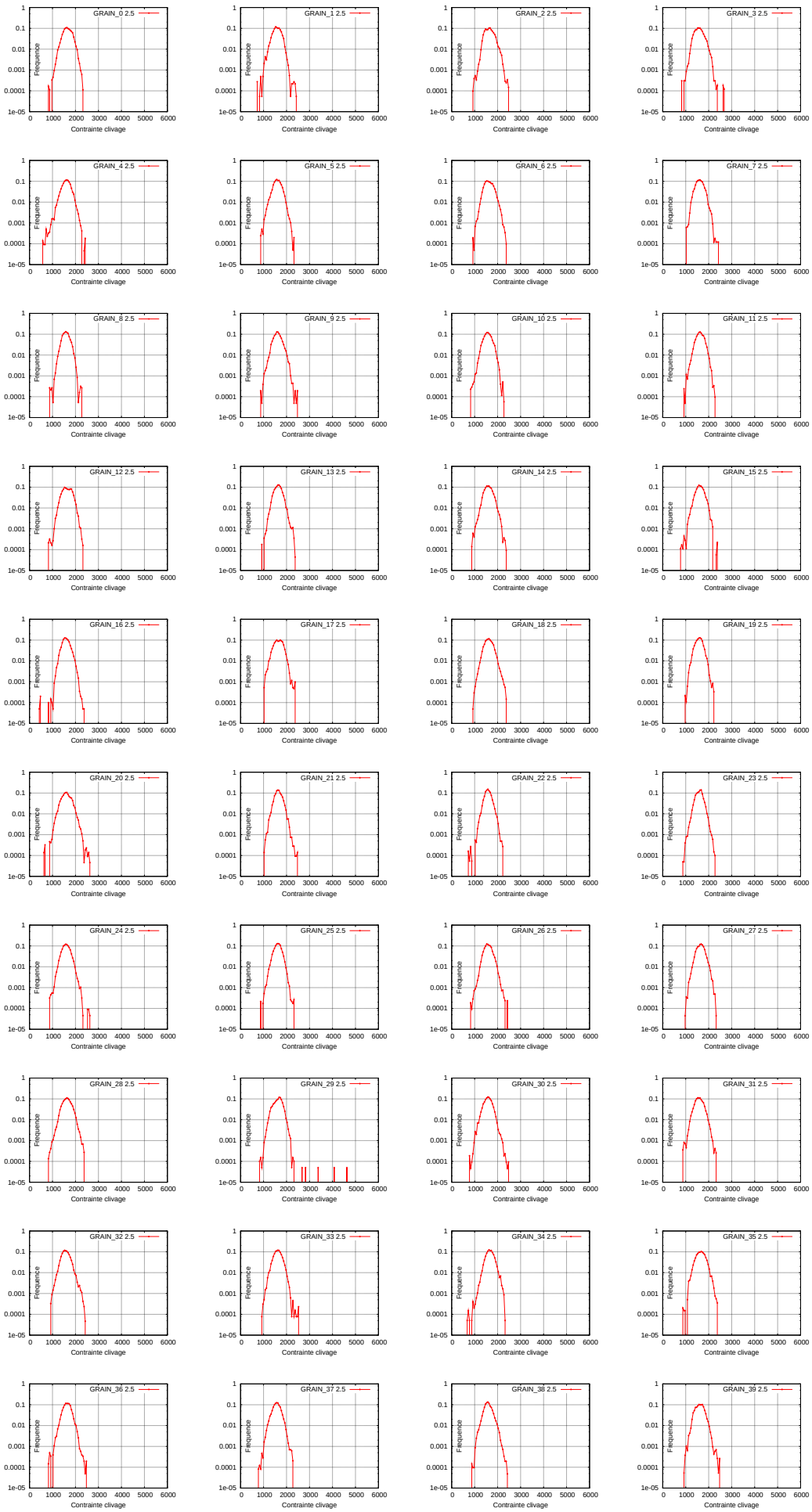


FIG. *A.69. Distribution de contrainte clivage dans les GRAINS (MPa)*

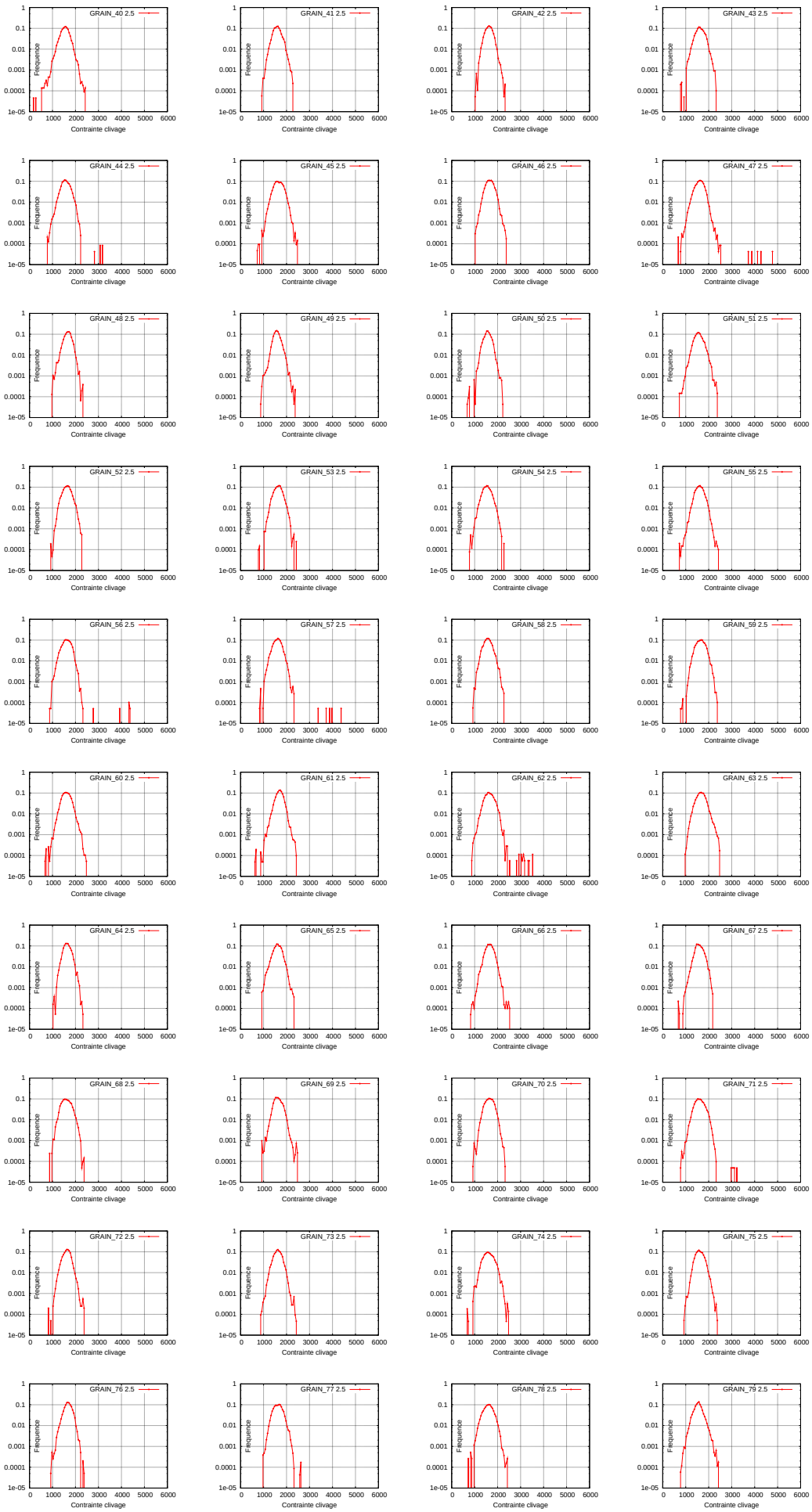


FIG. *A.70. Distribution de contrainte clivage dans les GRAINS (MPa)*

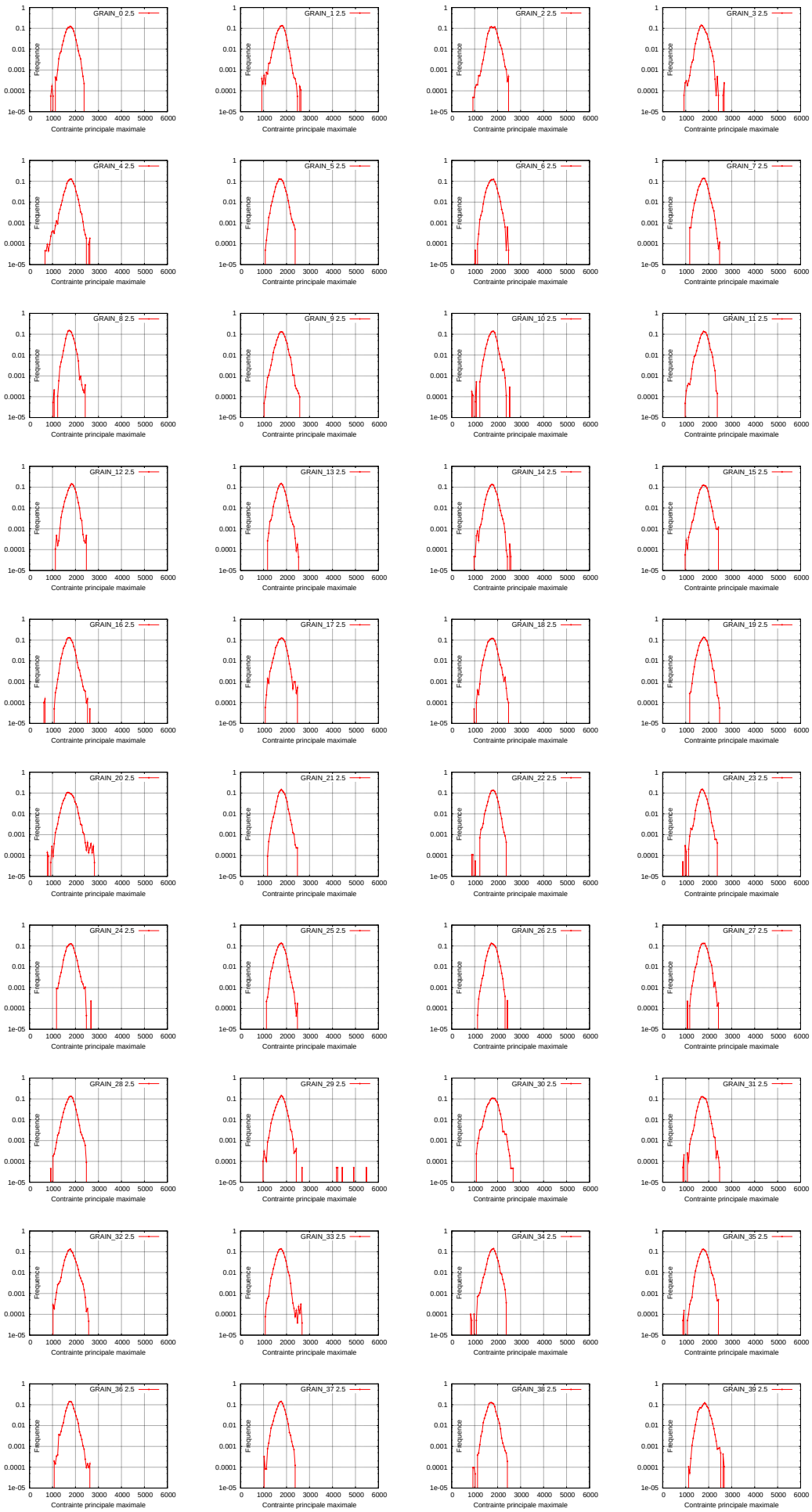


FIG. *A.71. Distribution de contrainte principale maximale dans les GRAINS (MPa)*

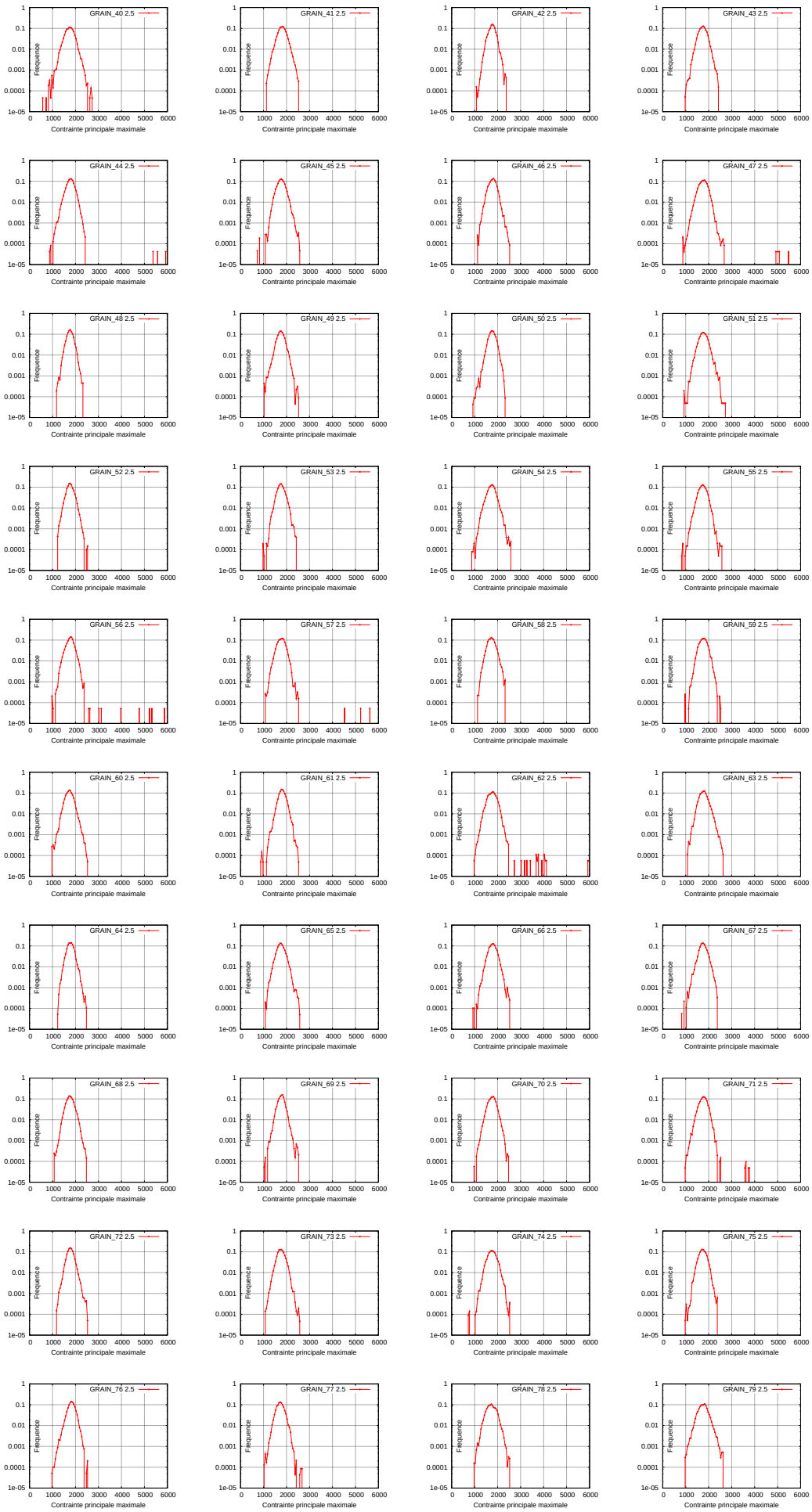


FIG. *A.72. Distribution de contrainte principale maximale dans les GRAINS (MPa)*

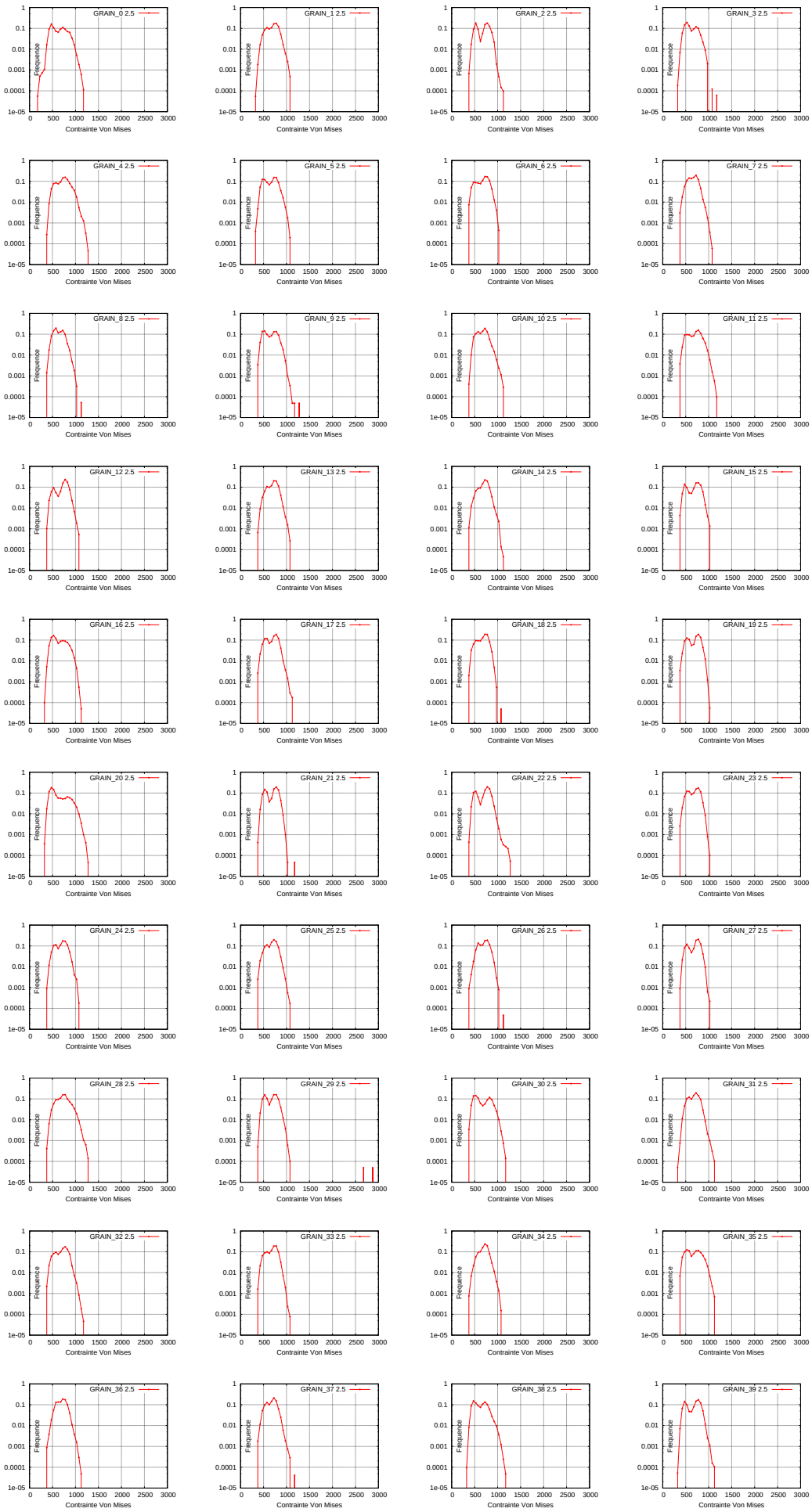


FIG. *A.73. Distribution de contrainte Von Mises dans les GRAINS (MPa)*

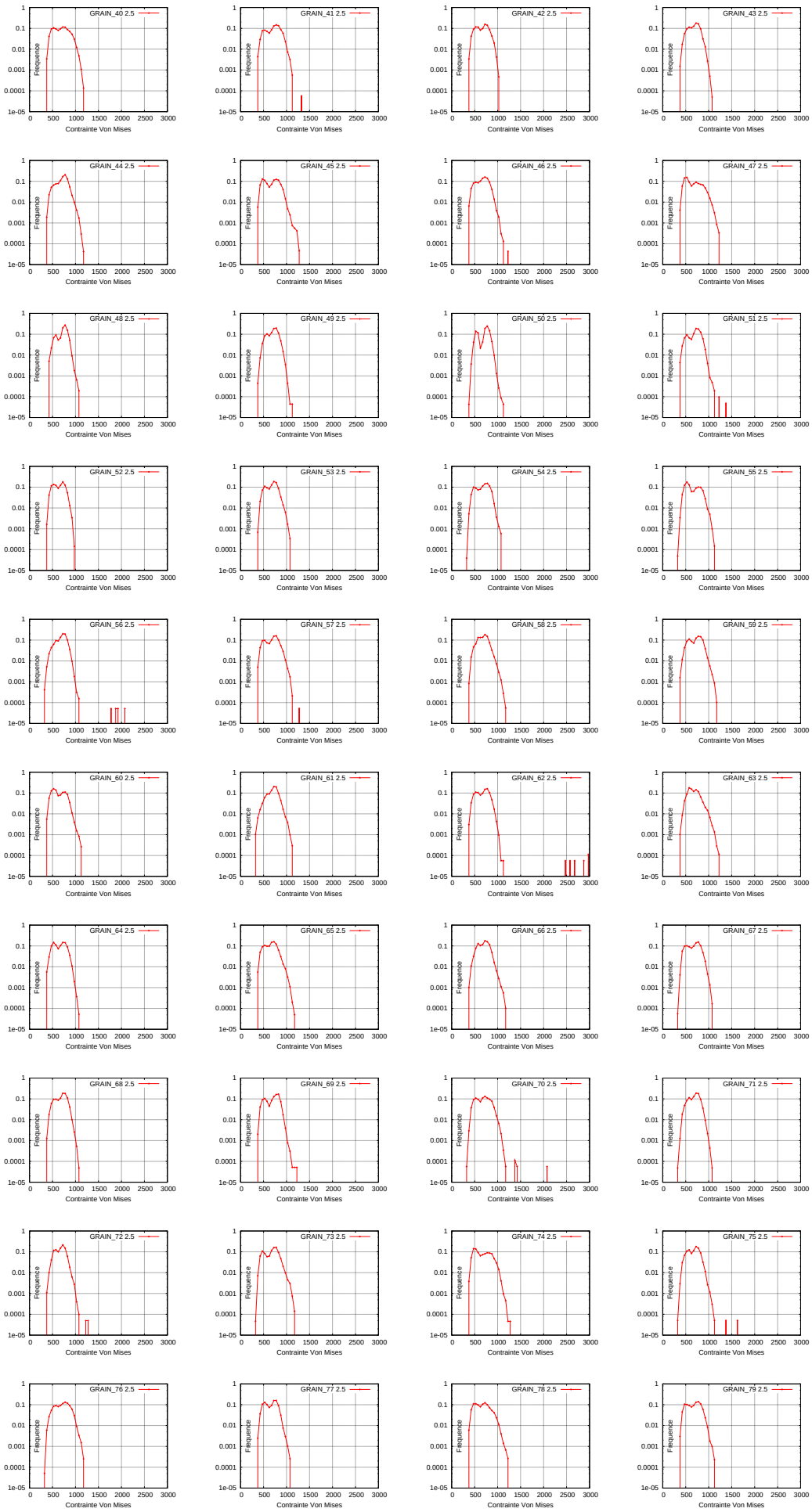


FIG. *A.74. Distribution de contrainte Von Mises dans les GRAINS (MPa)*

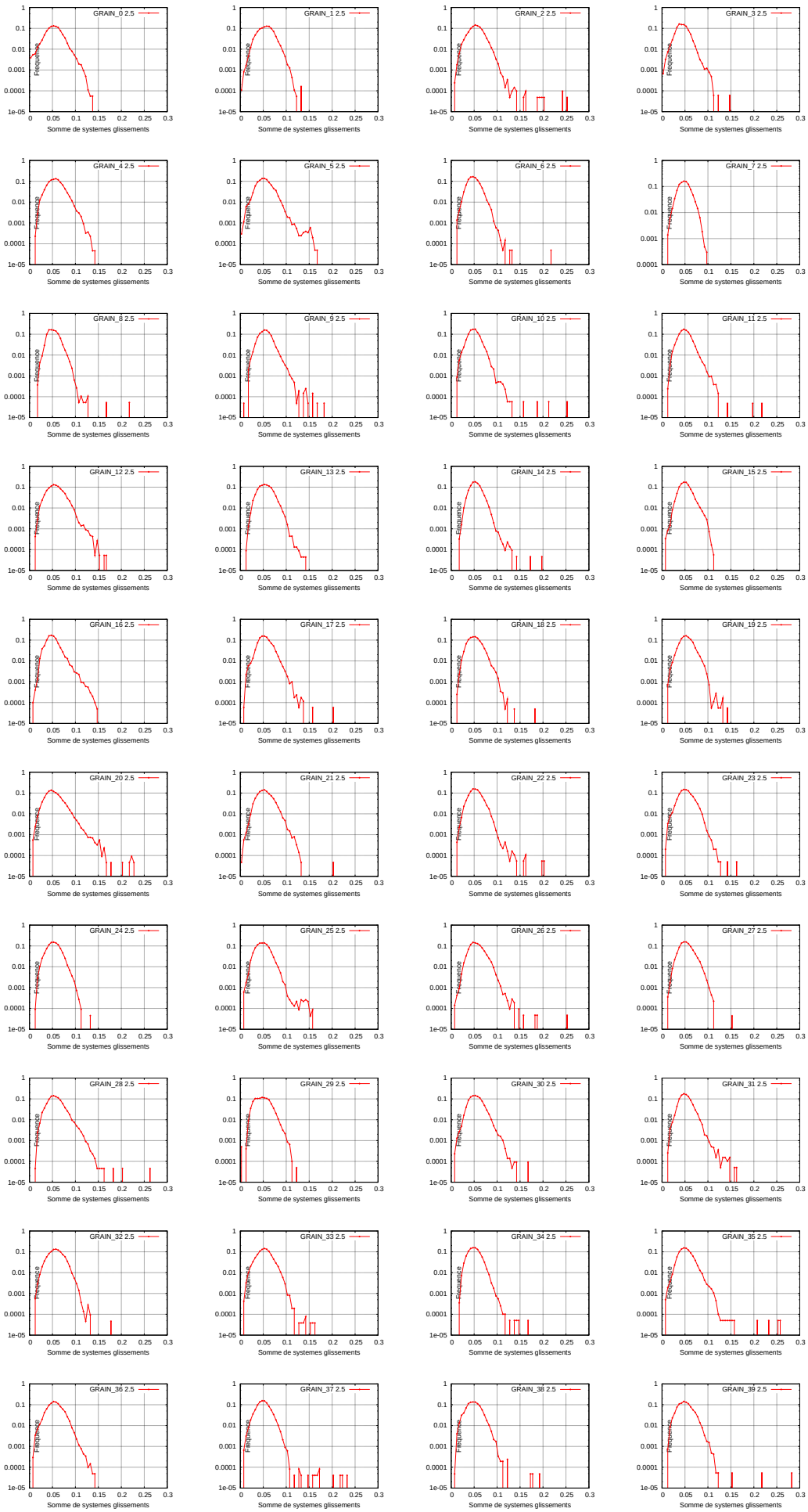


FIG. *A.75. Distribution de la somme de glissements des systèmes dans les GRAINS*

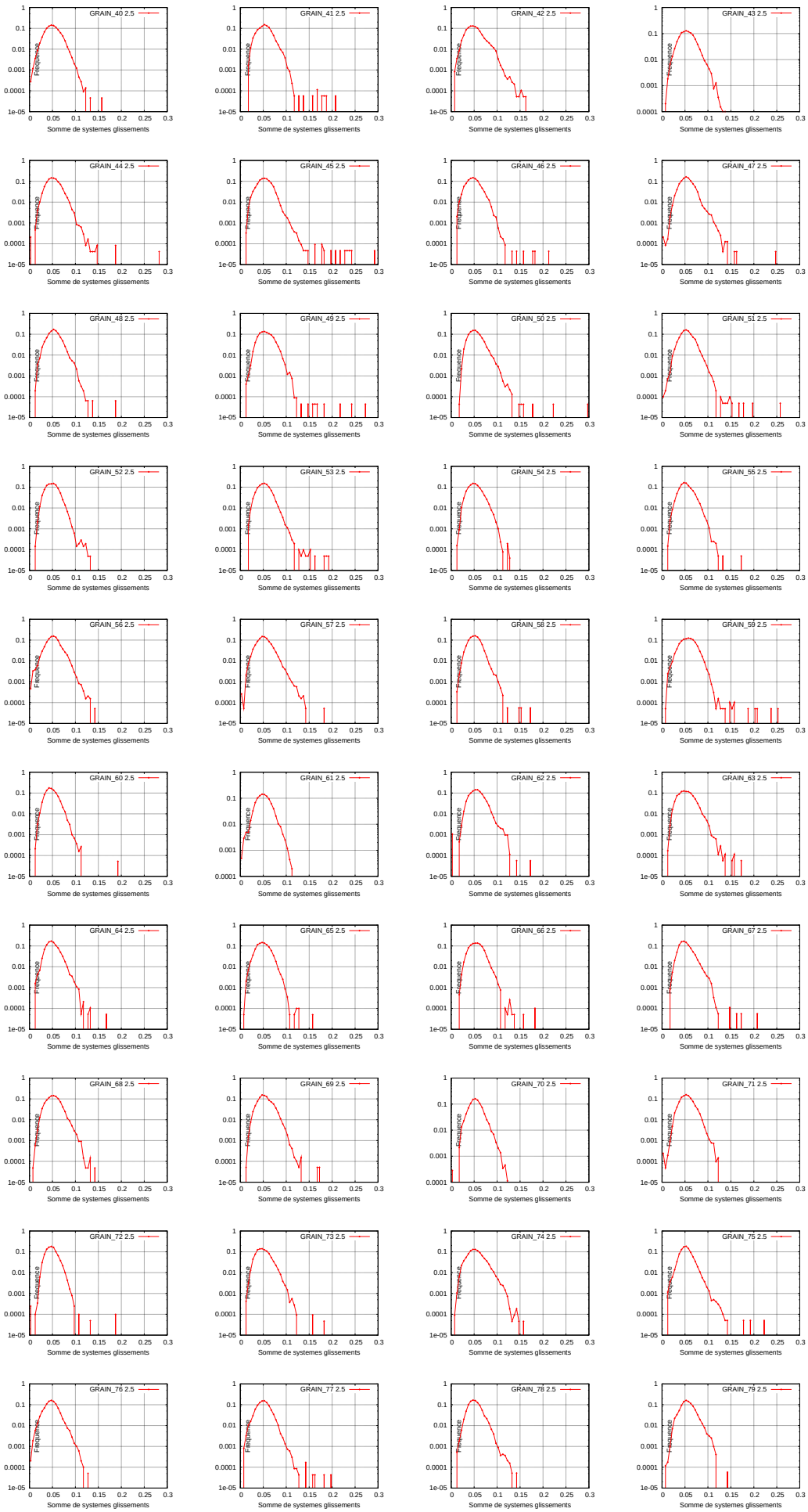


FIG. *A.76. Distribution de la somme de glissements des systèmes dans les GRAINS*

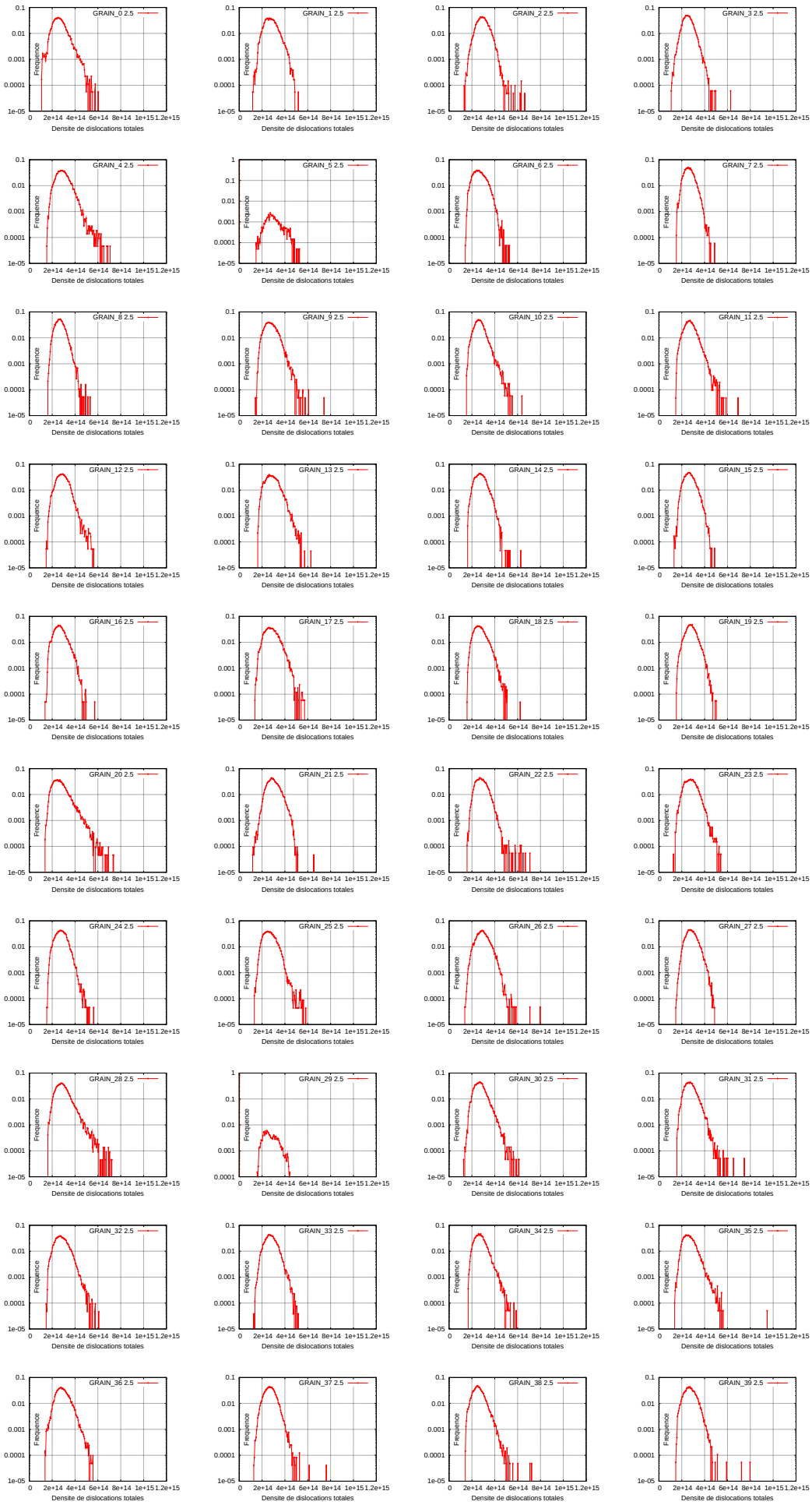


FIG. *A.77. Distribution de la densité de dislocations totales dans les GRAINS*

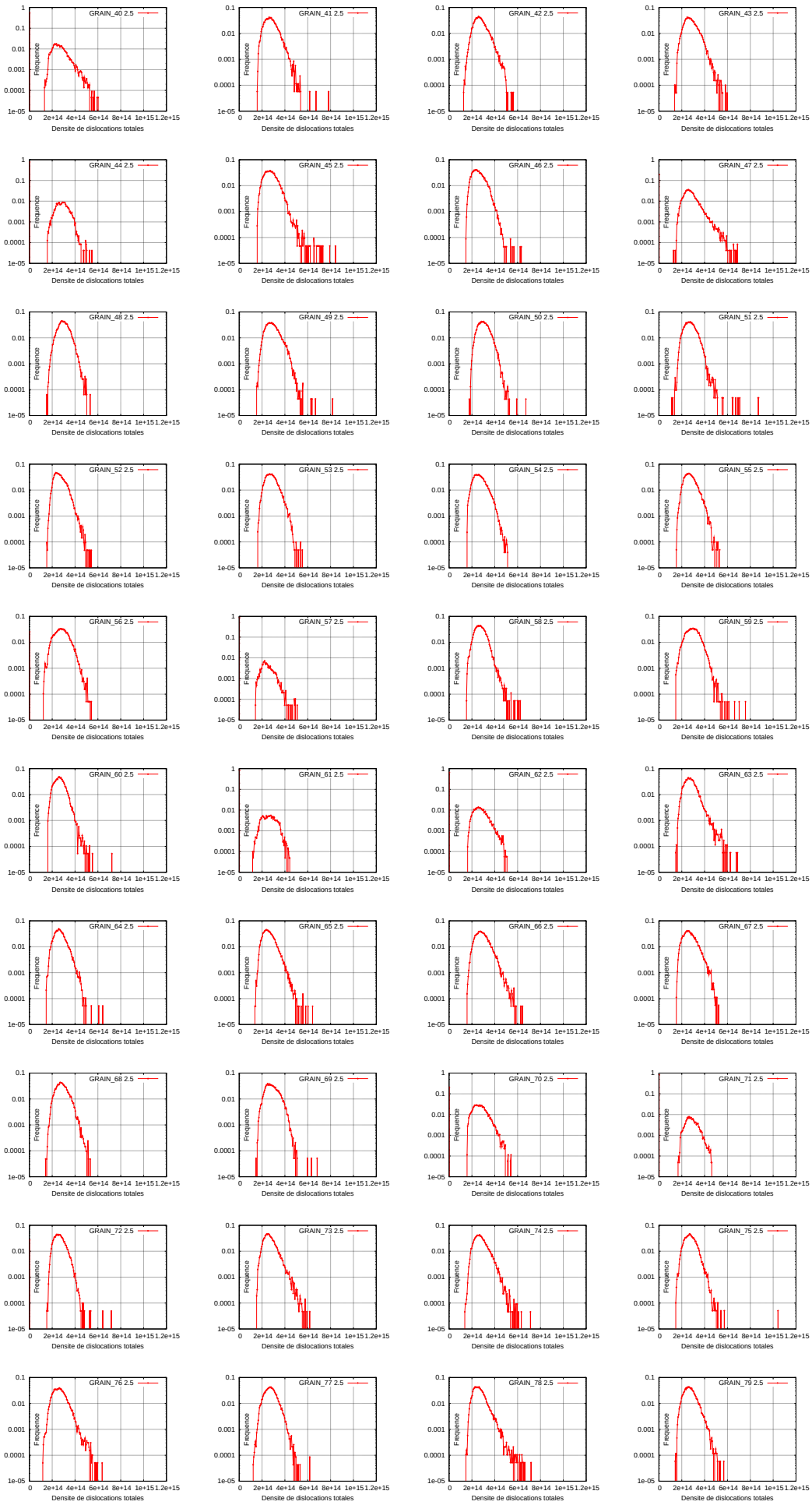


FIG. *A.78. Distribution de la densité de dislocations totales dans les GRAINS*

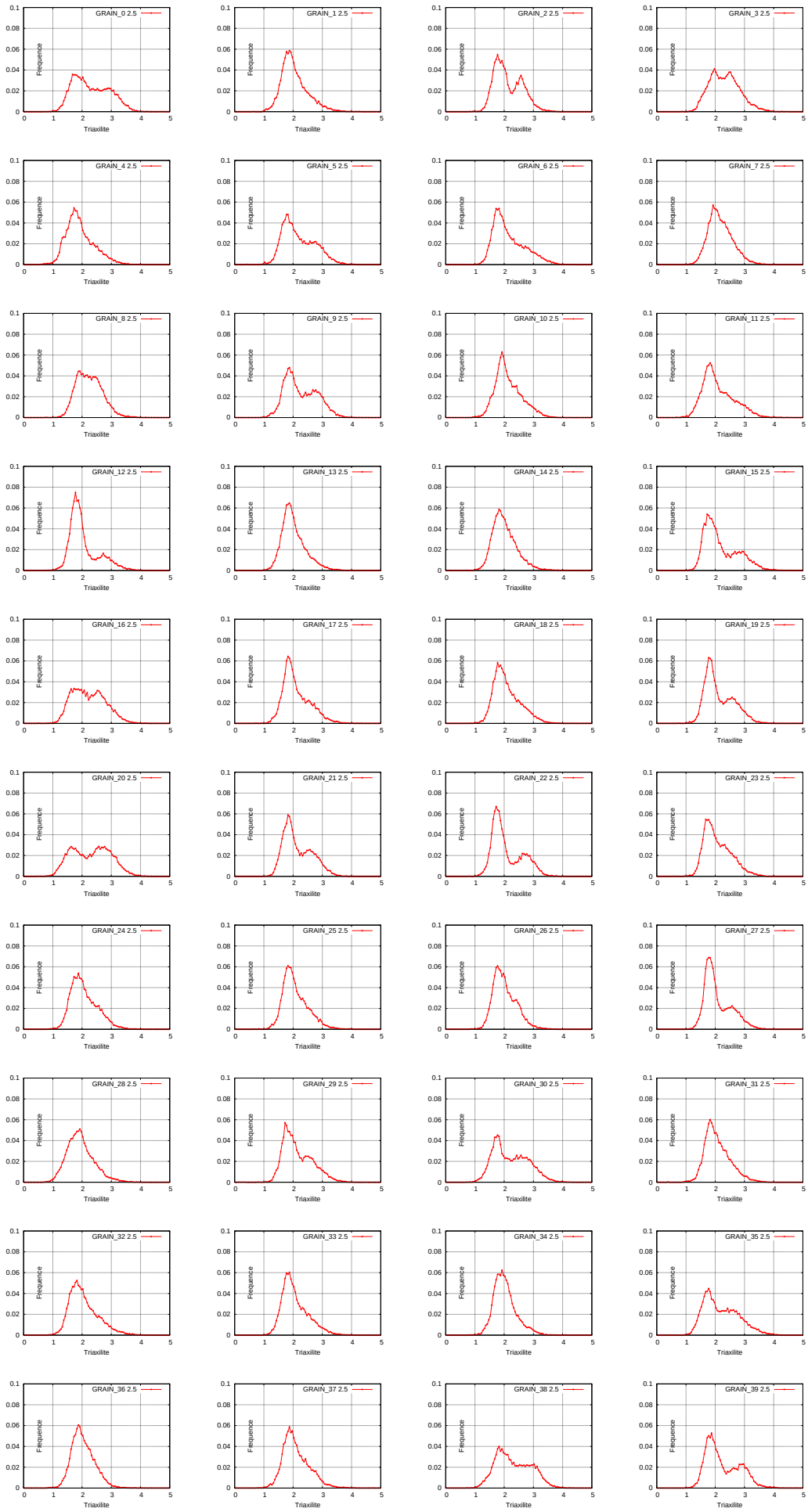


FIG. *A.79. Distribution de la triaxilité dans les GRAINS*

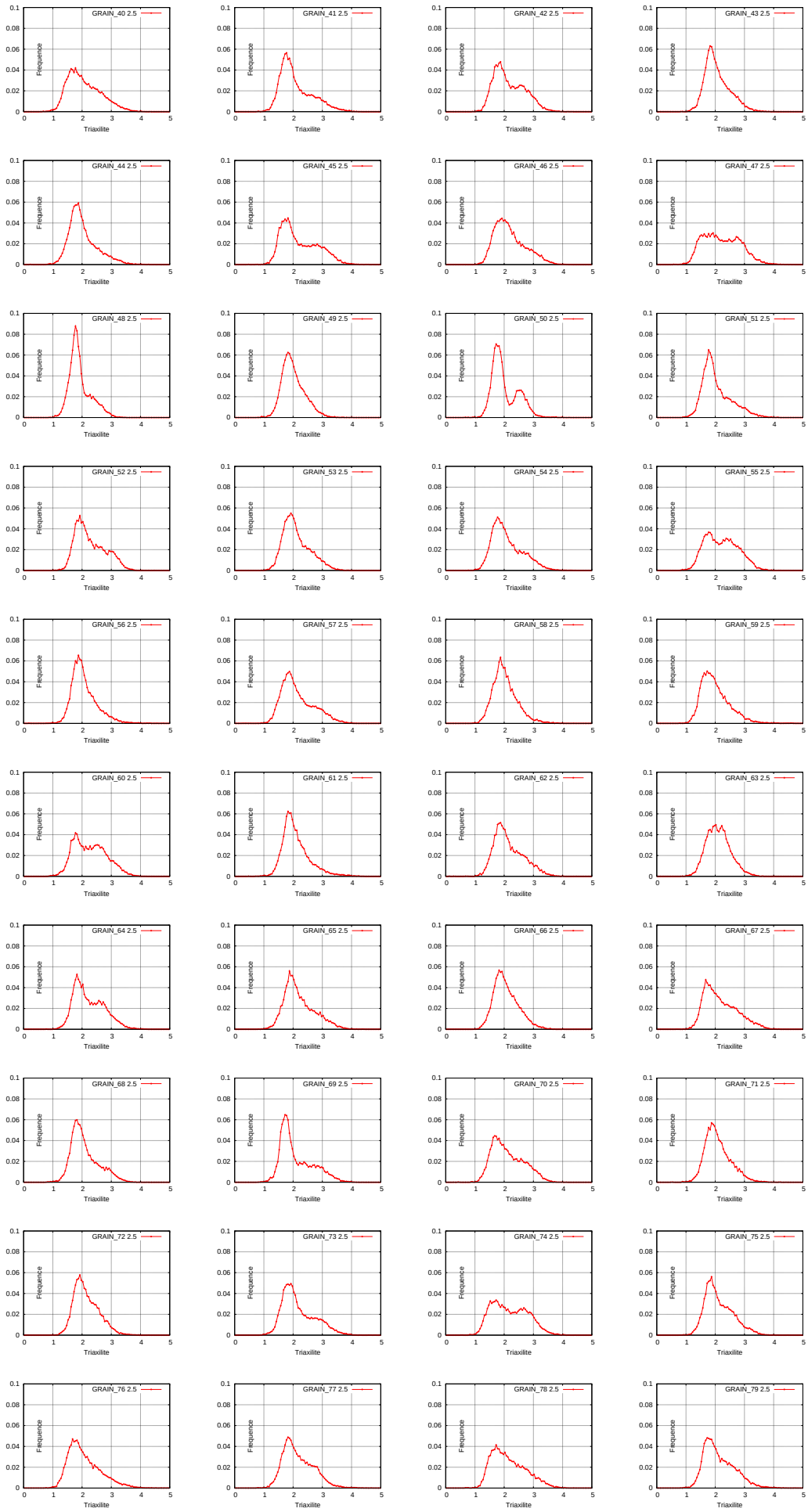


FIG. *A.80. Distribution de la triaxilité dans les GRAINS*

A.2.2 Matériaux irradié à température −90°C

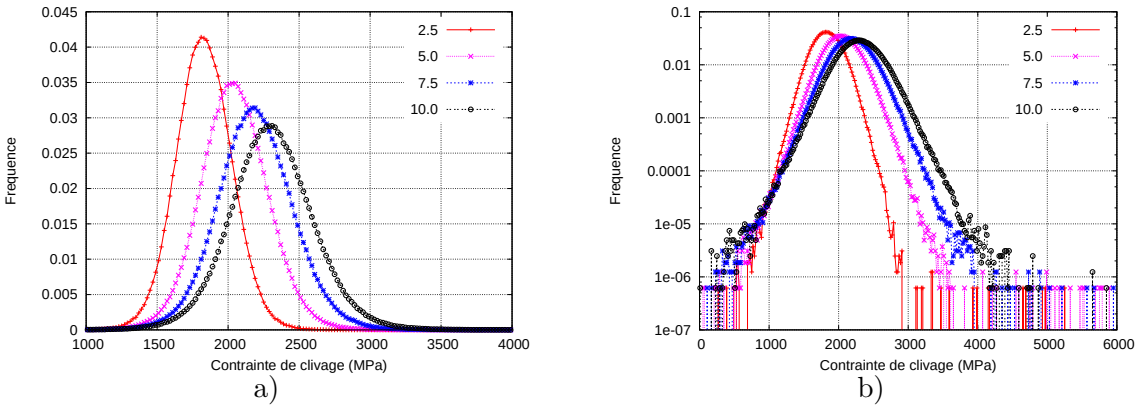


FIG. *A.81. Distribution de contrainte de clivage au 2.5%, 5.0%, 7.5% et 10.0% déformation équivalente*

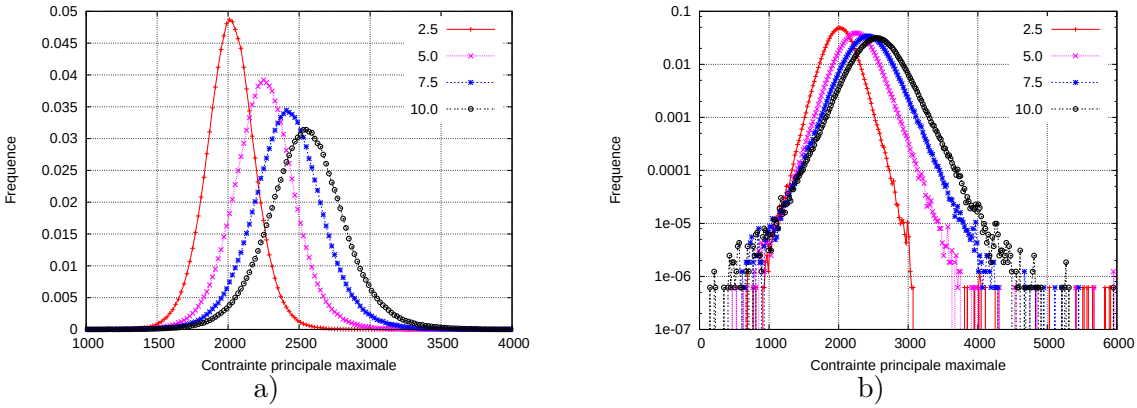


FIG. *A.82. Distribution de contrainte principale maximale au 2.5%, 5.0%, 7.5% et 10.0% déformation équivalente*

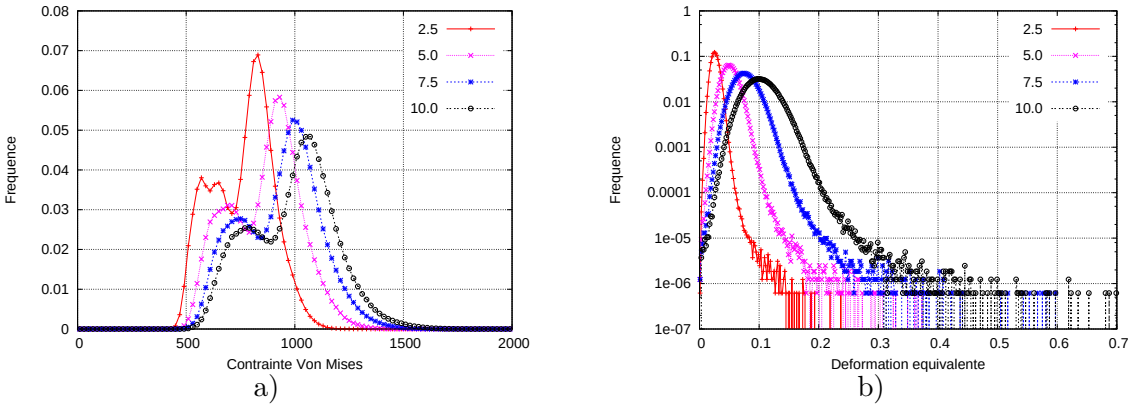
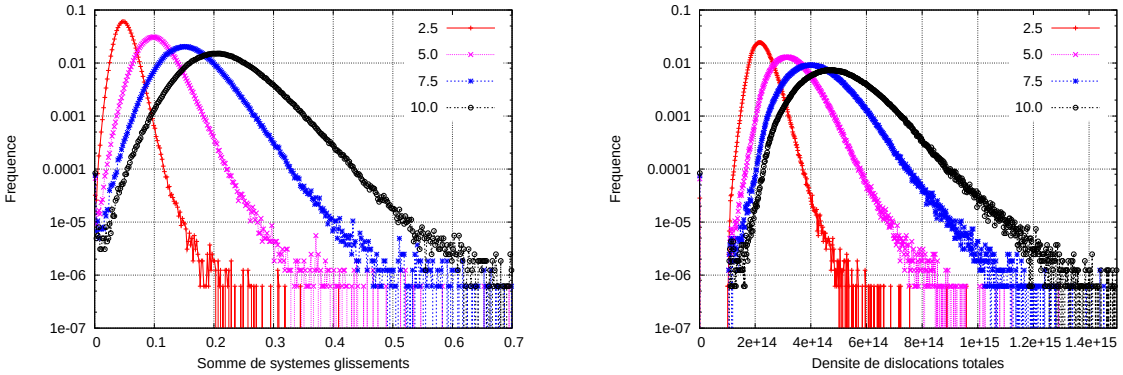


FIG. *A.83. Distribution de contrainte Von Mises a) et déformation équivalente b) au 2.5%, 5.0%, 7.5% et 10.0% déformation équivalente*



a) b)

FIG. *A.84. Distributions de la somme de systèmes glissement a) et la densité de dislocations totale b) au 2.5 %, 5.0%, 7.5% et 10.0% déformation équivalente*

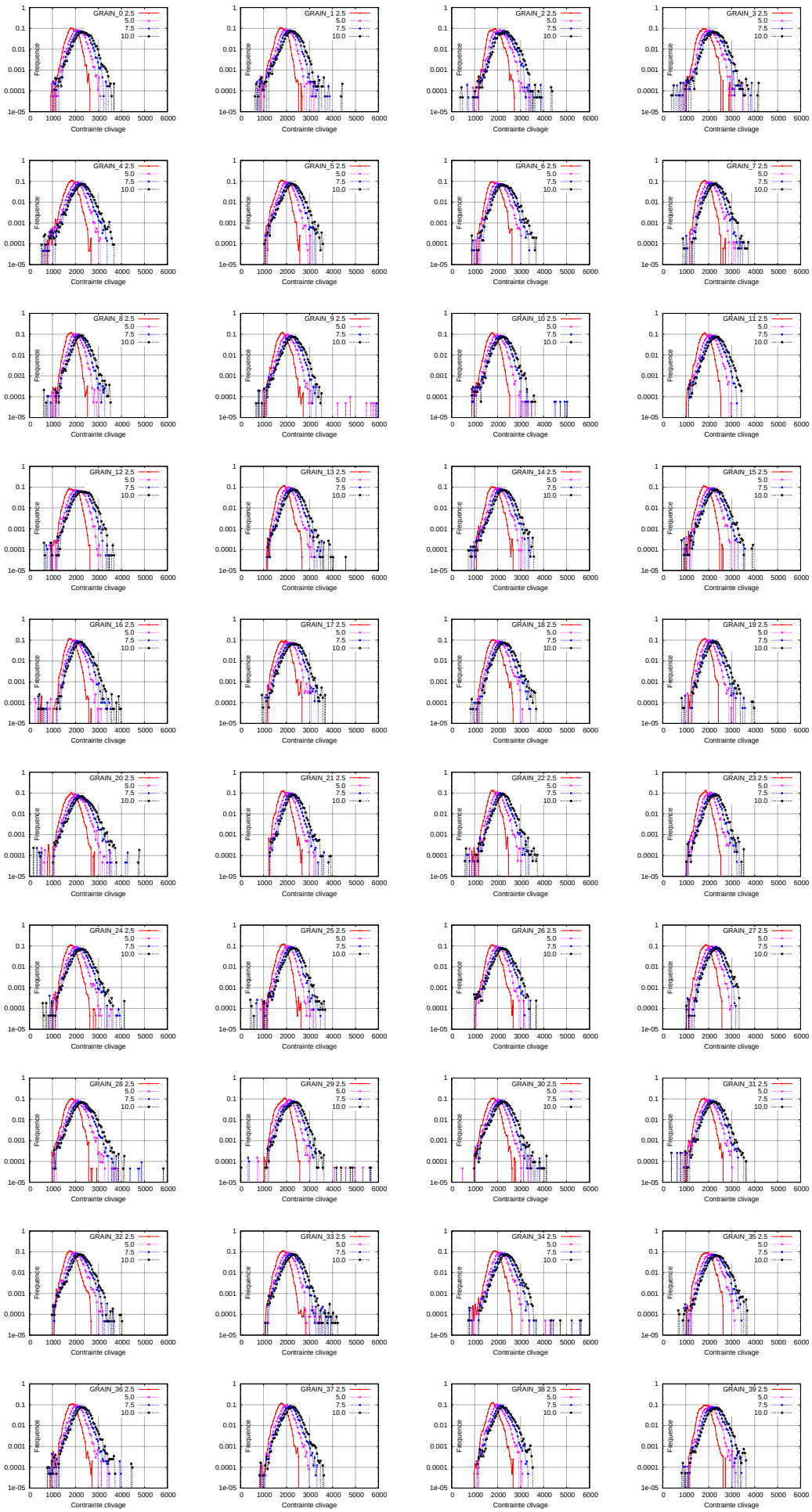


FIG. *A.85. Distribution de contrainte clivage dans les GRAINS (MPa)*

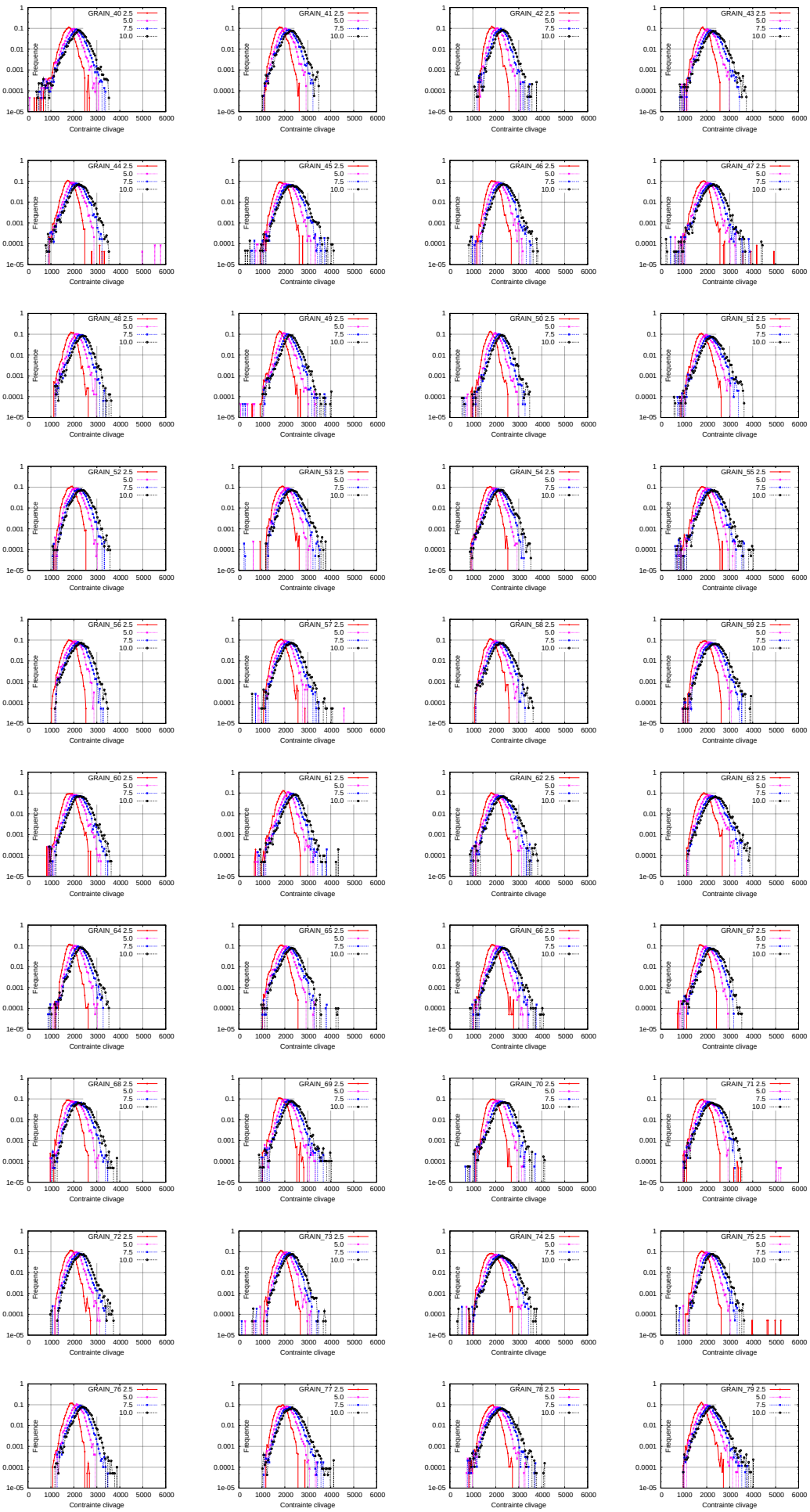


FIG. *A.86. Distribution de contrainte clivage dans les GRAINS (MPa)*

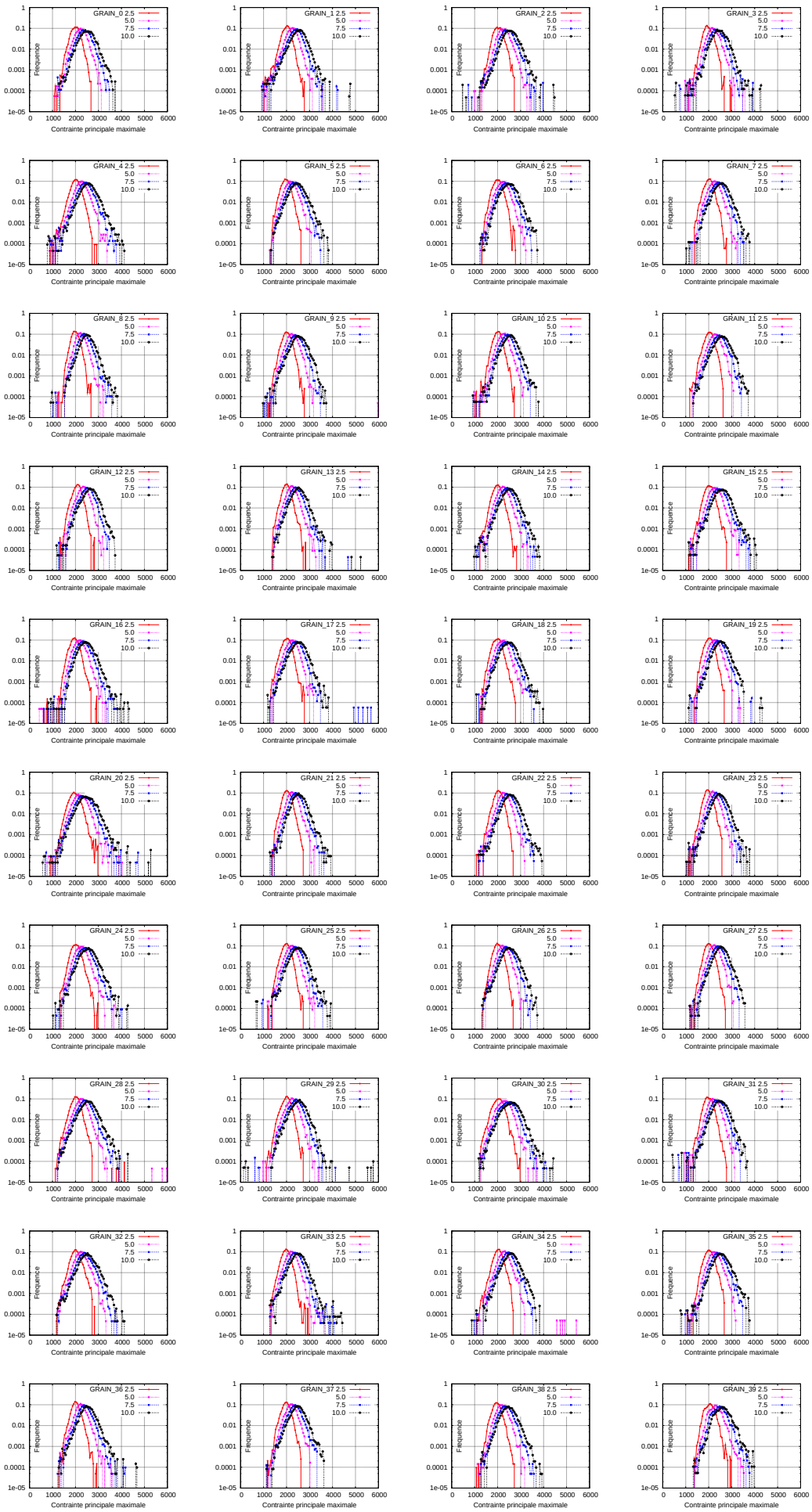


FIG. *A.87. Distribution de contrainte principale maximale dans les GRAINS (MPa)*

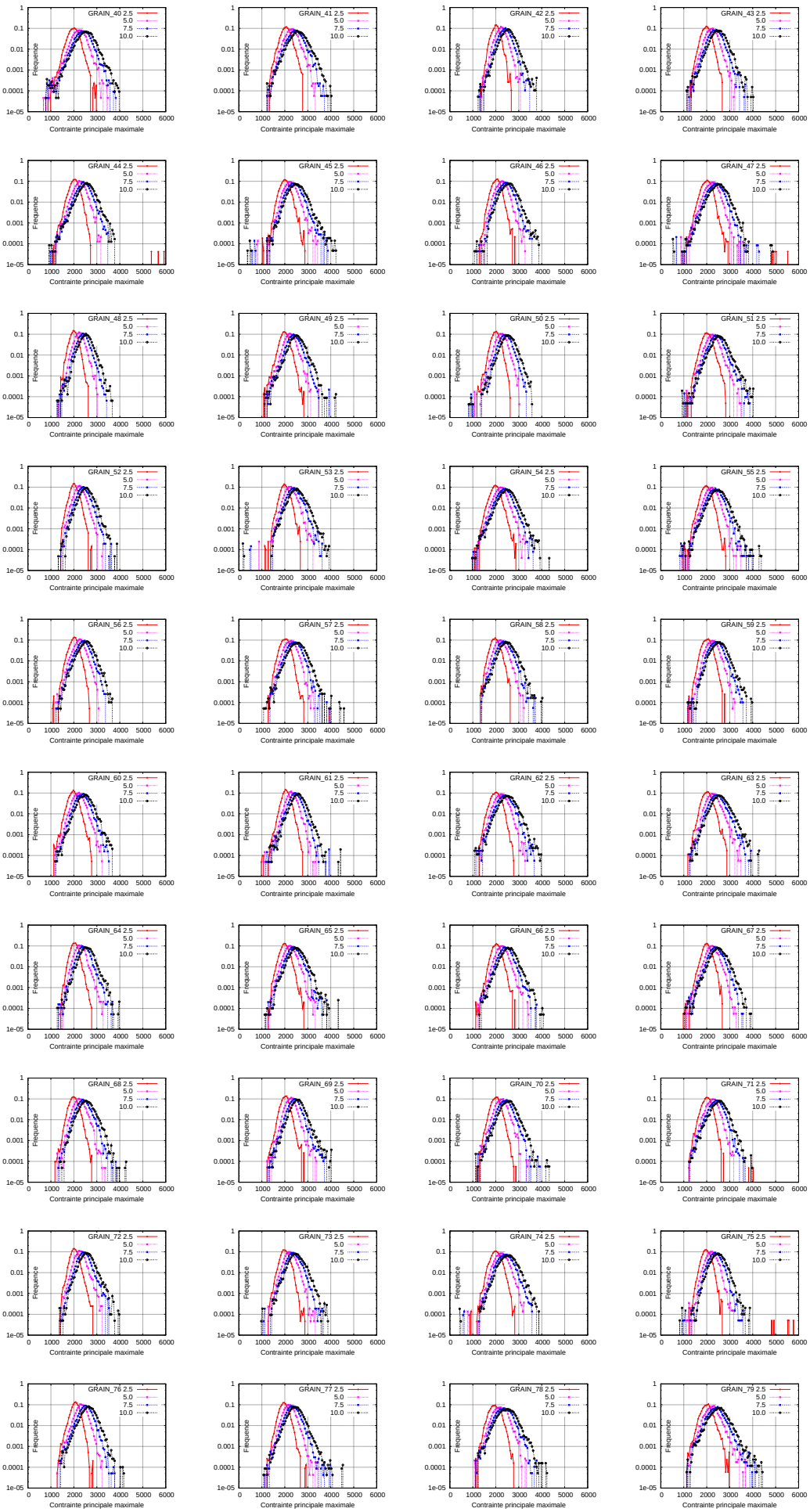


FIG. *A.88. Distribution de contrainte principale maximale dans les GRAINS (MPa)*

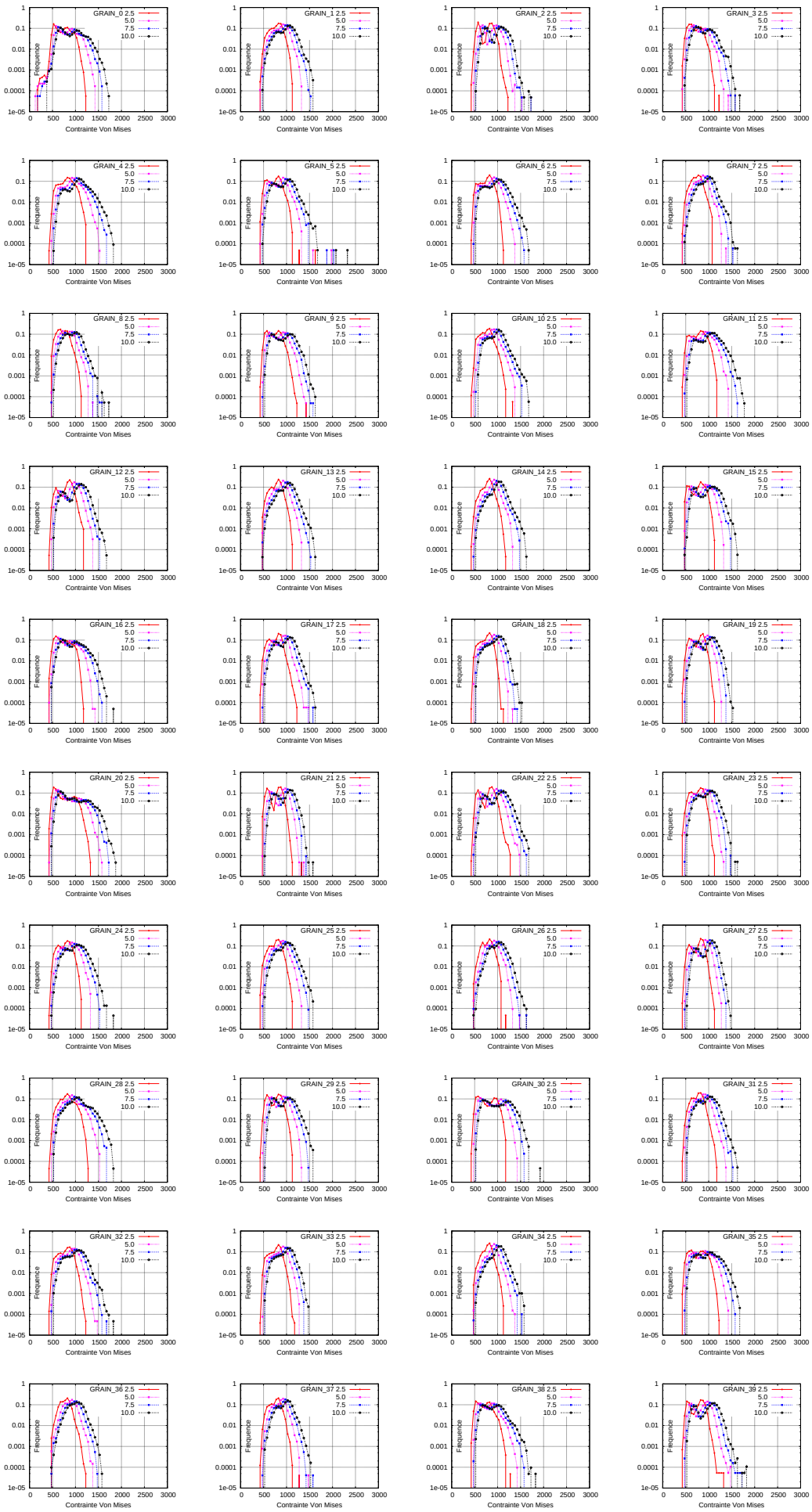


FIG. *A.89. Distribution de contrainte Von Mises dans les GRAINS (MPa)*

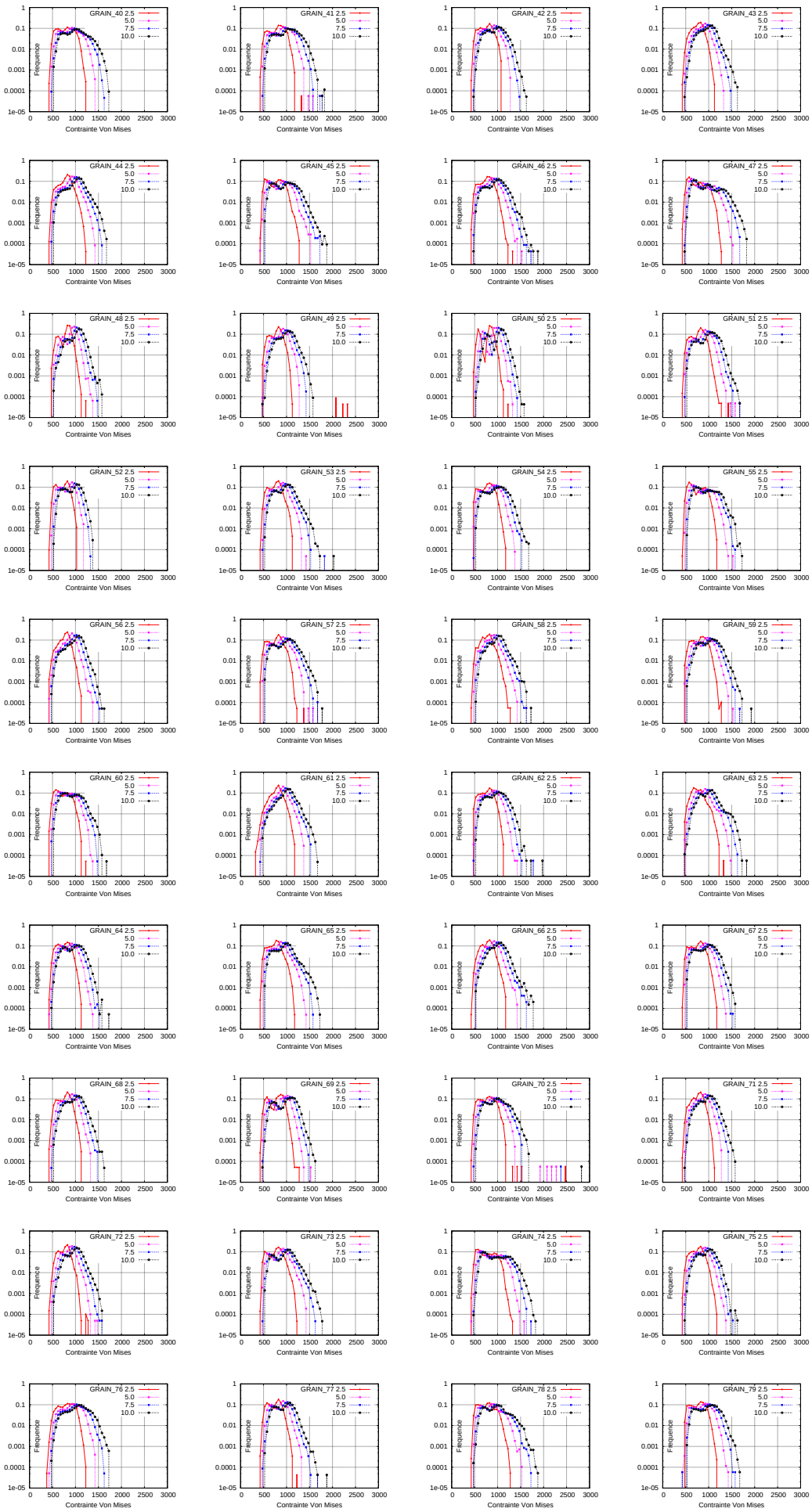


FIG. *A.90. Distribution de contrainte Von Mises dans les GRAINS (MPa)*

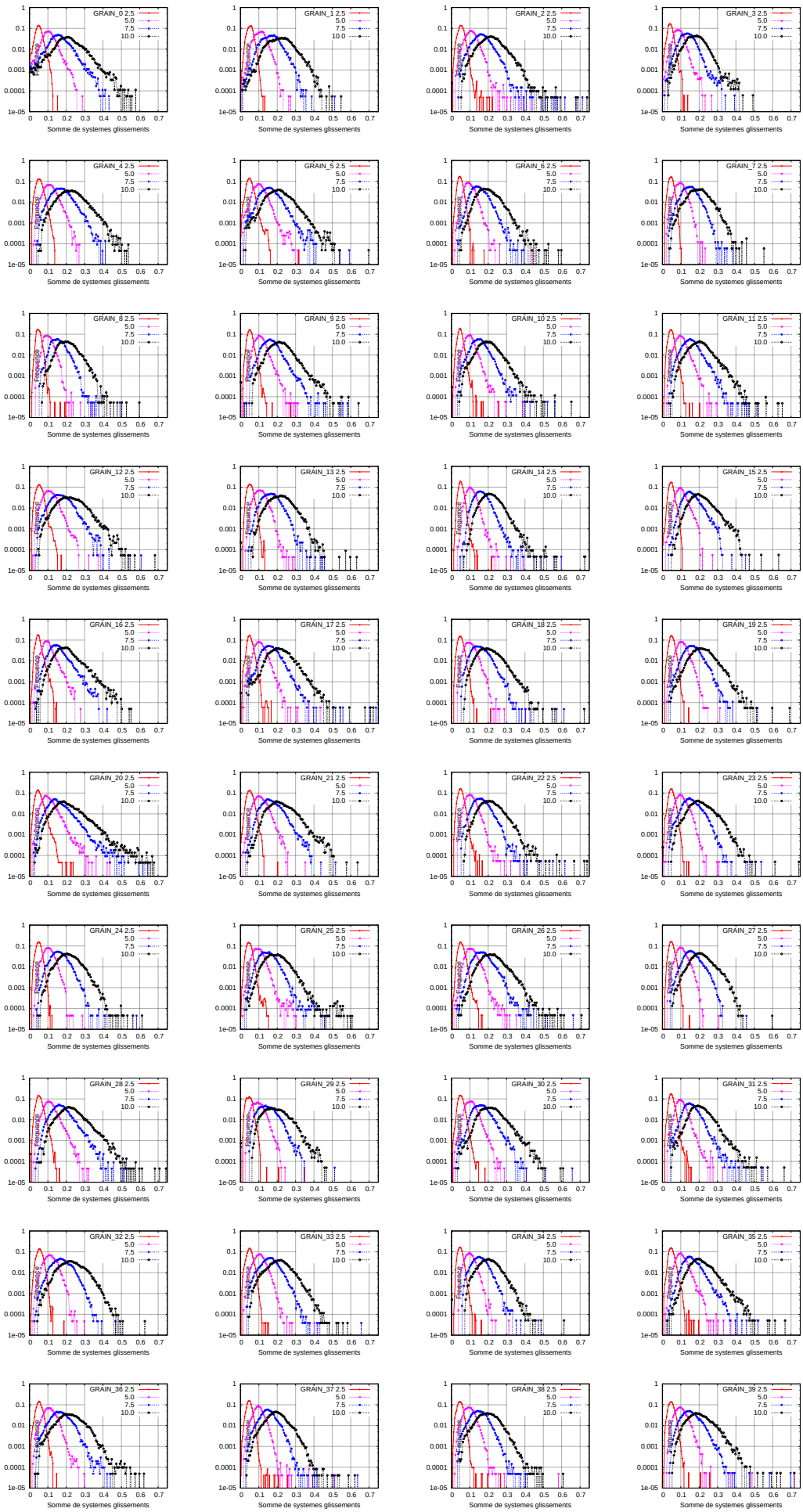


FIG. *A.91. Distribution de la somme de glissements des systèmes dans les GRAINS*

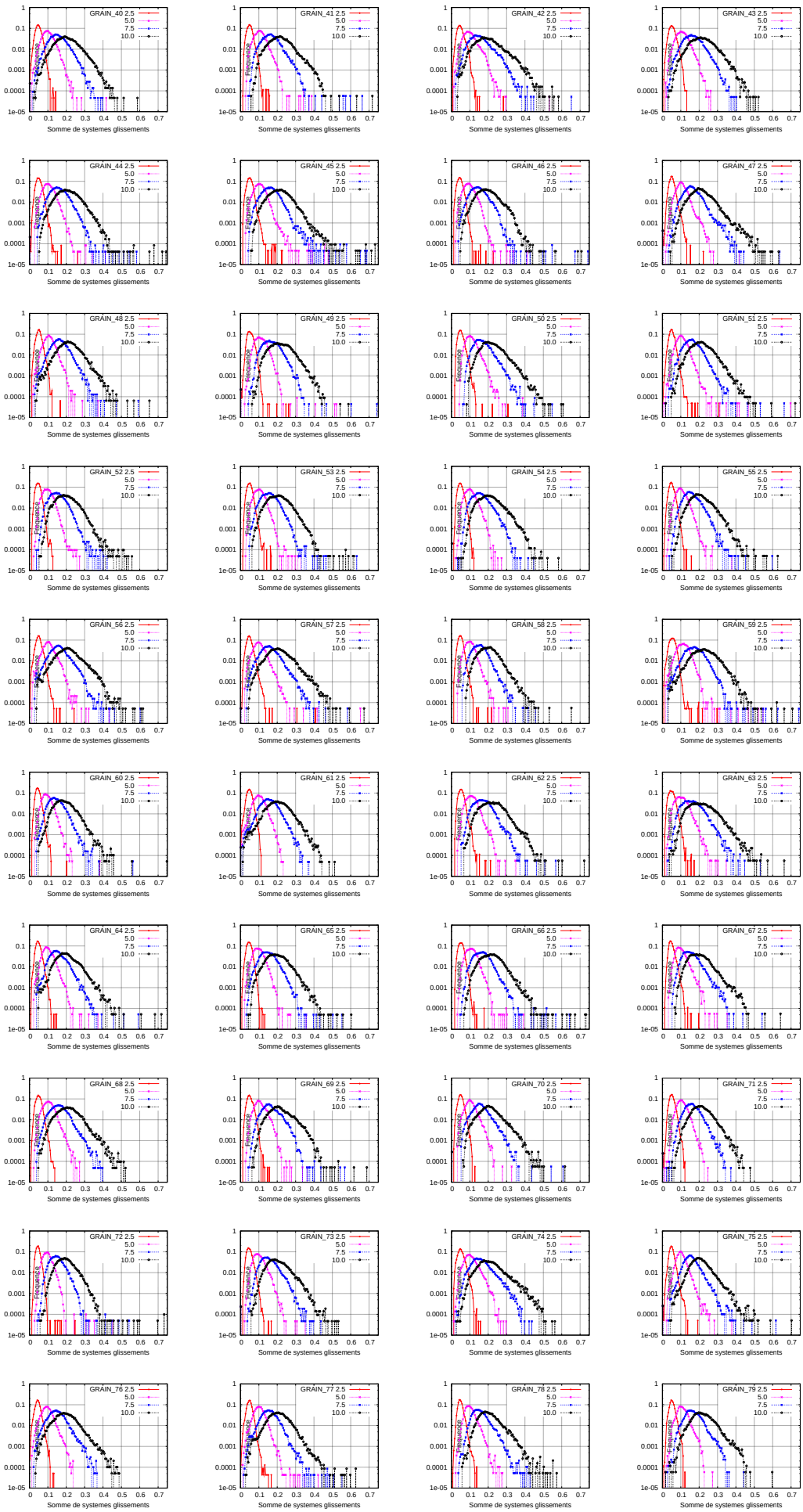


FIG. *A.92. Distribution de la somme de glissements des systèmes dans les GRAINS*

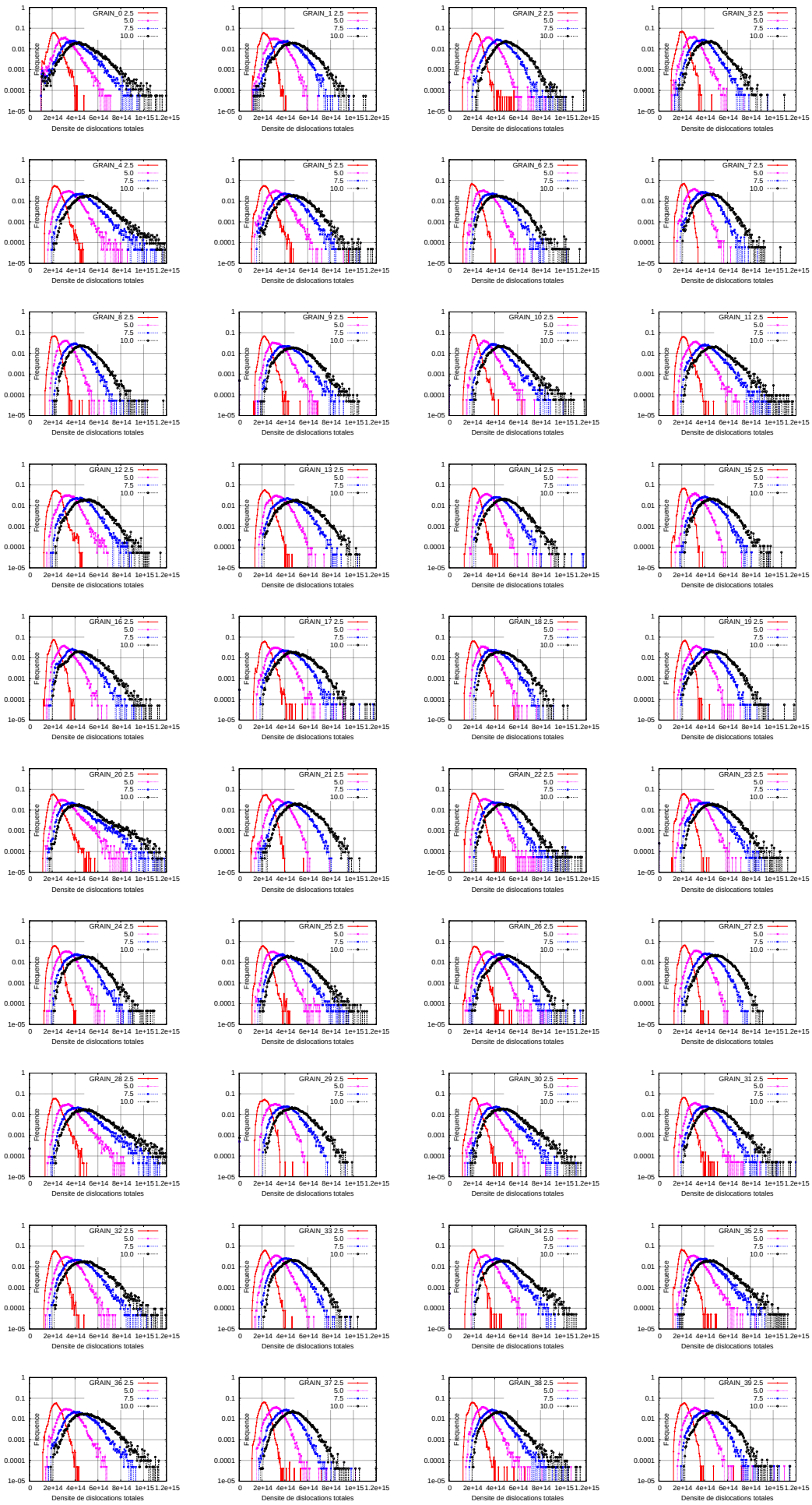


FIG. *A.93. Distribution de la densité de dislocations totales dans les GRAINS*

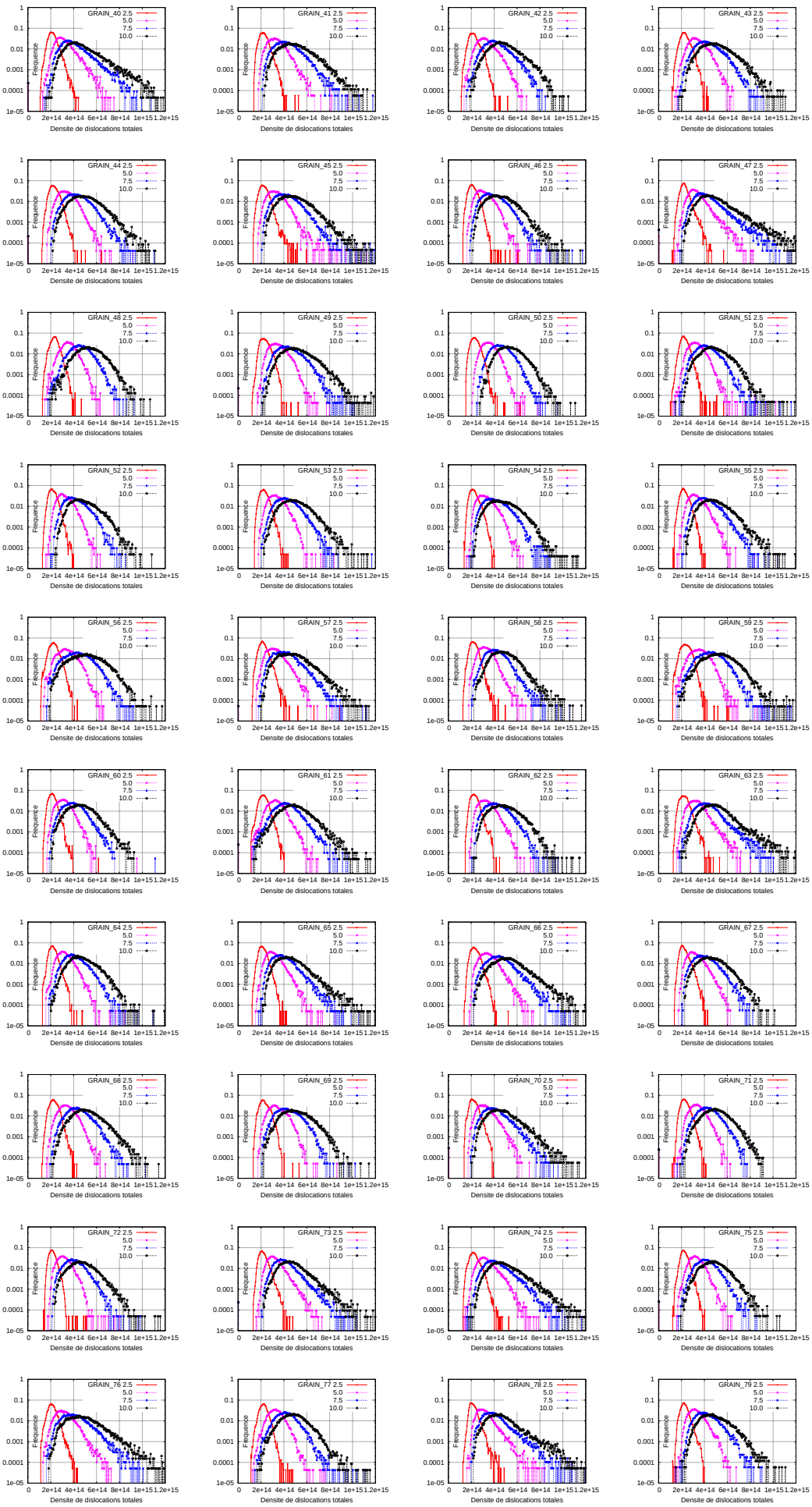


FIG. *A.94. Distribution de la densité de dislocations totales dans les GRAINS*

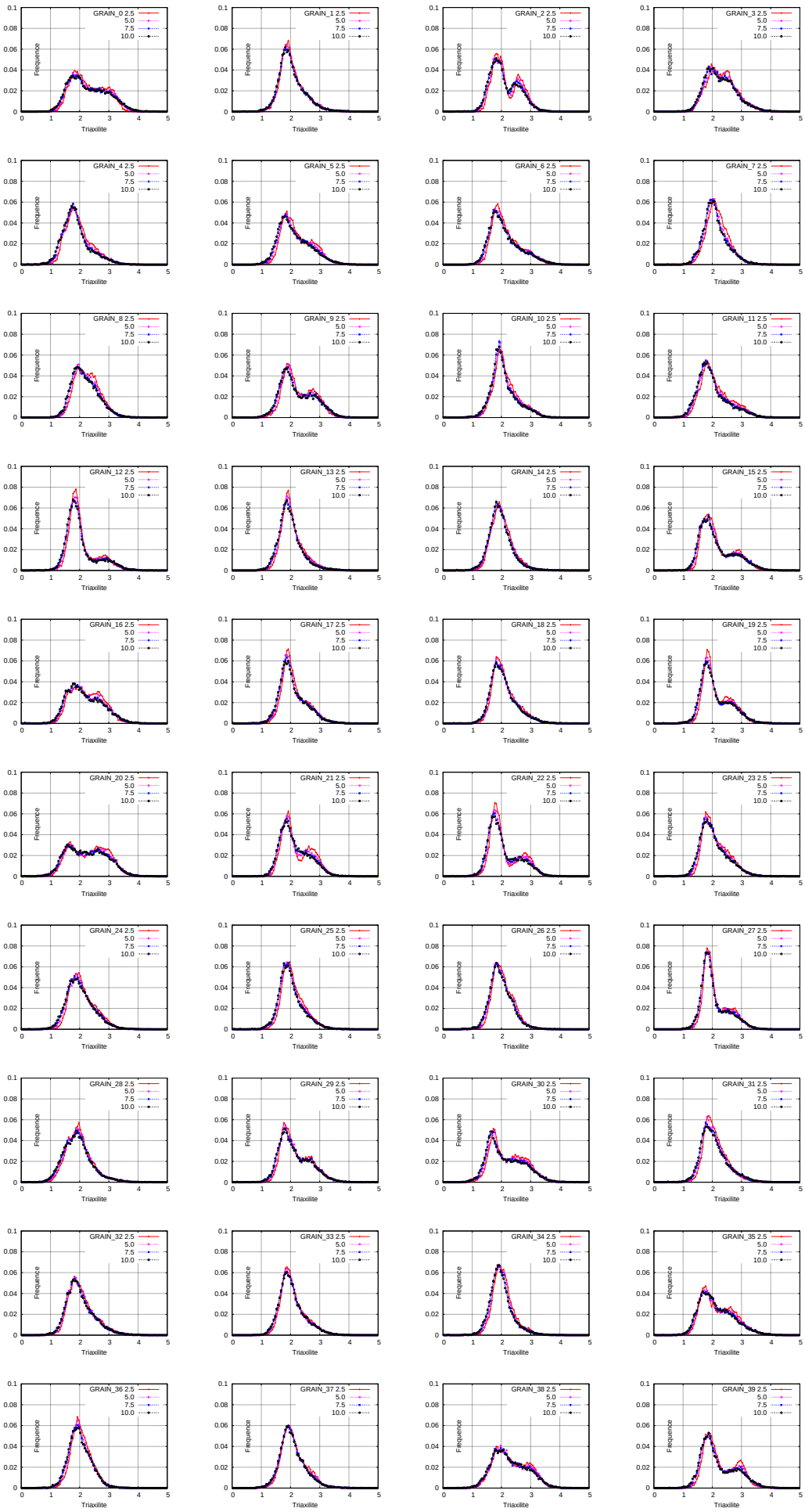


FIG. *A.95. Distribution de la triaxilité dans les GRAINS*

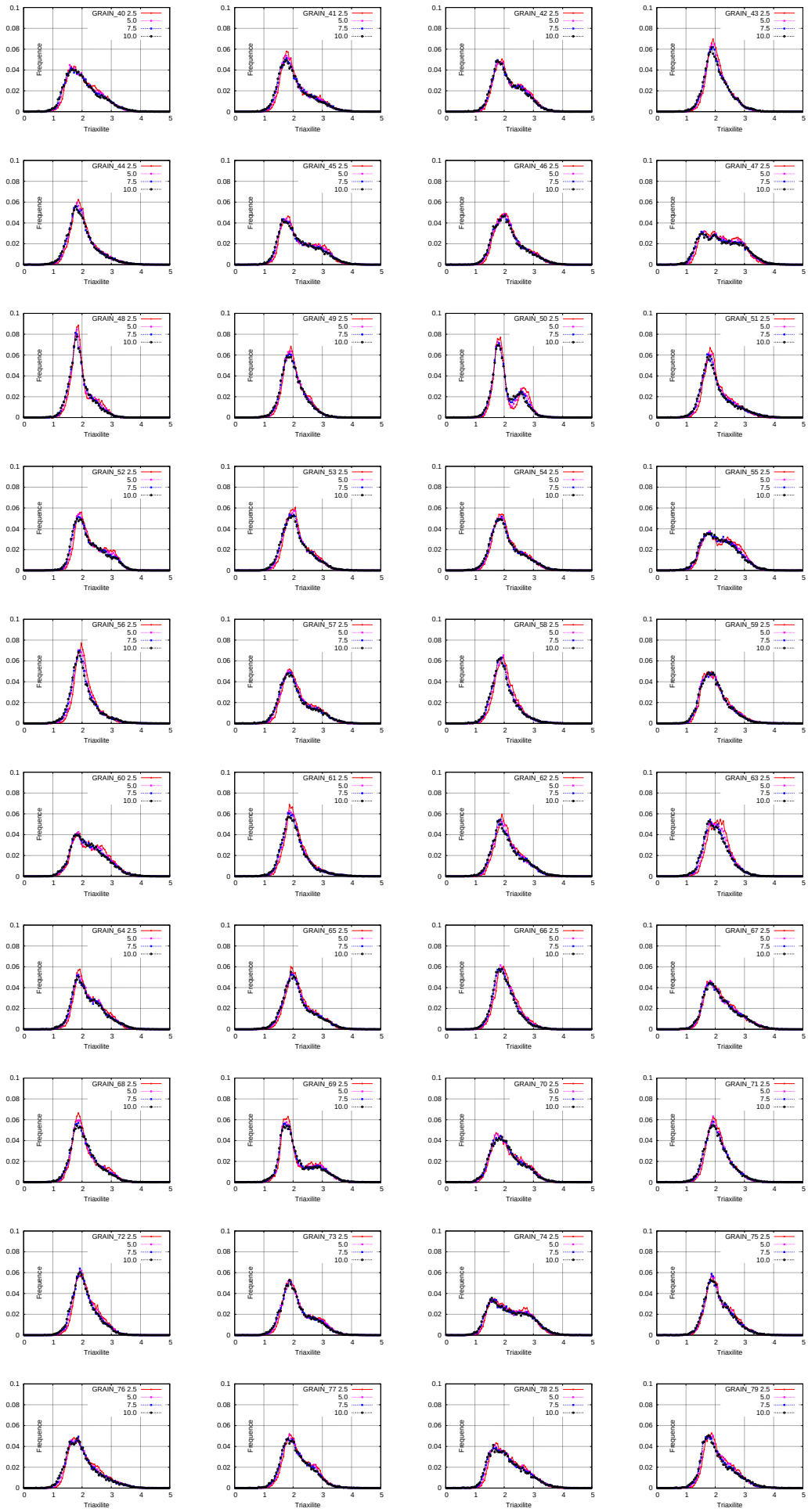


FIG. *A.96. Distribution de la triaxilité dans les GRAINS*

A.2.3 Matériaux non irradié à température −120°C

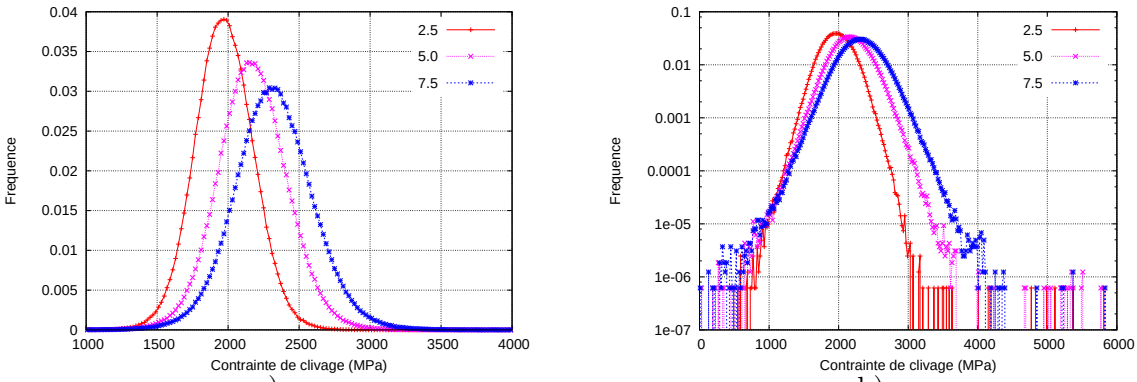


FIG. *A.97. Distribution de contrainte de clivage au 2.5%, 5.0%, 7.5% déformation équivalente*

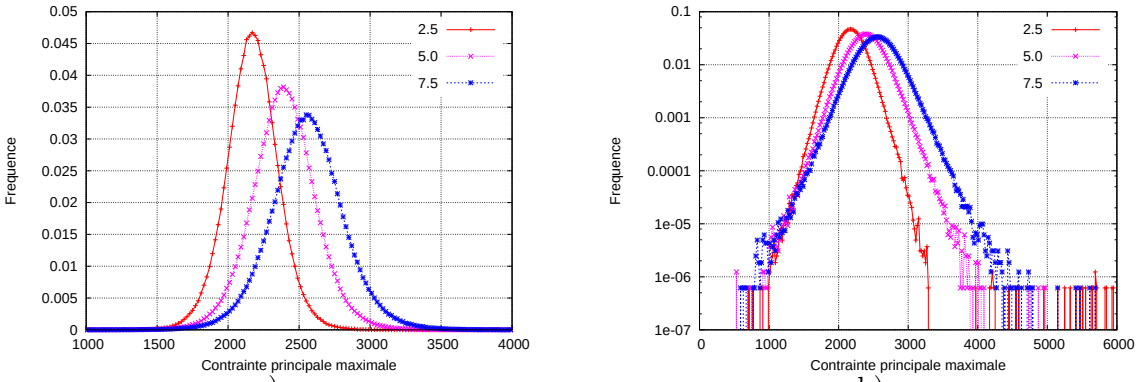


FIG. *A.98. Distribution de contrainte principale maximale au 2.5%, 5.0%, 7.5% déformation équivalente*

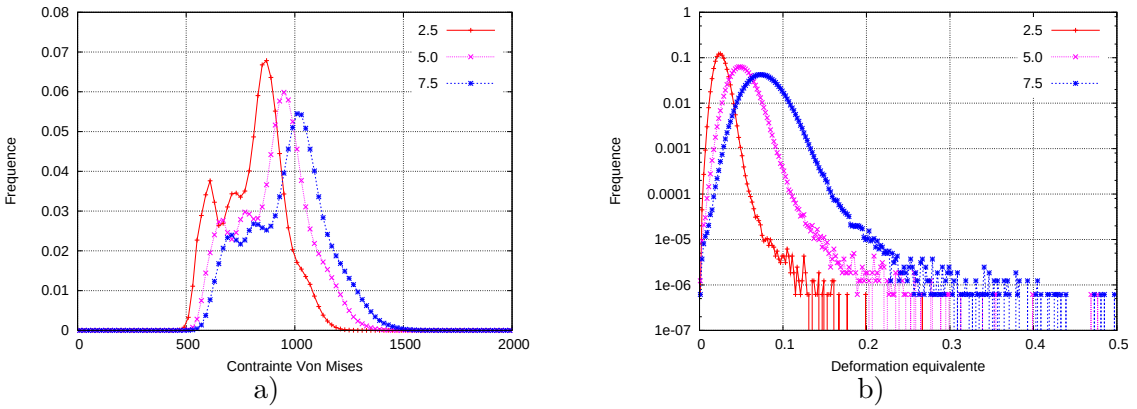
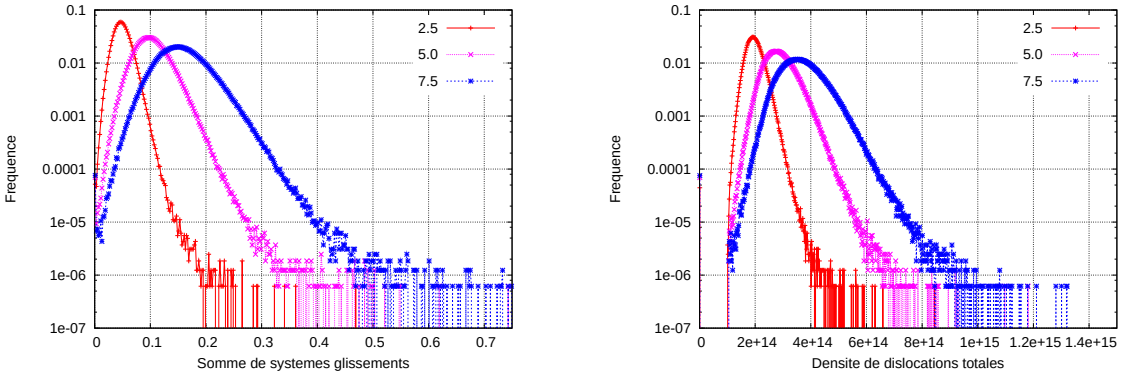


FIG. *A.99. Distribution de contrainte Von Mises a) et déformation équivalente b) au 2.5%, 5.0%, 7.5% déformation équivalente*



a) b)

FIG. *A.100. Distributions de la somme de systèmes glissement a) et la densité de dislocations totale b) au 2.5 %, 5.0%, 7.5% déformation équivalente*

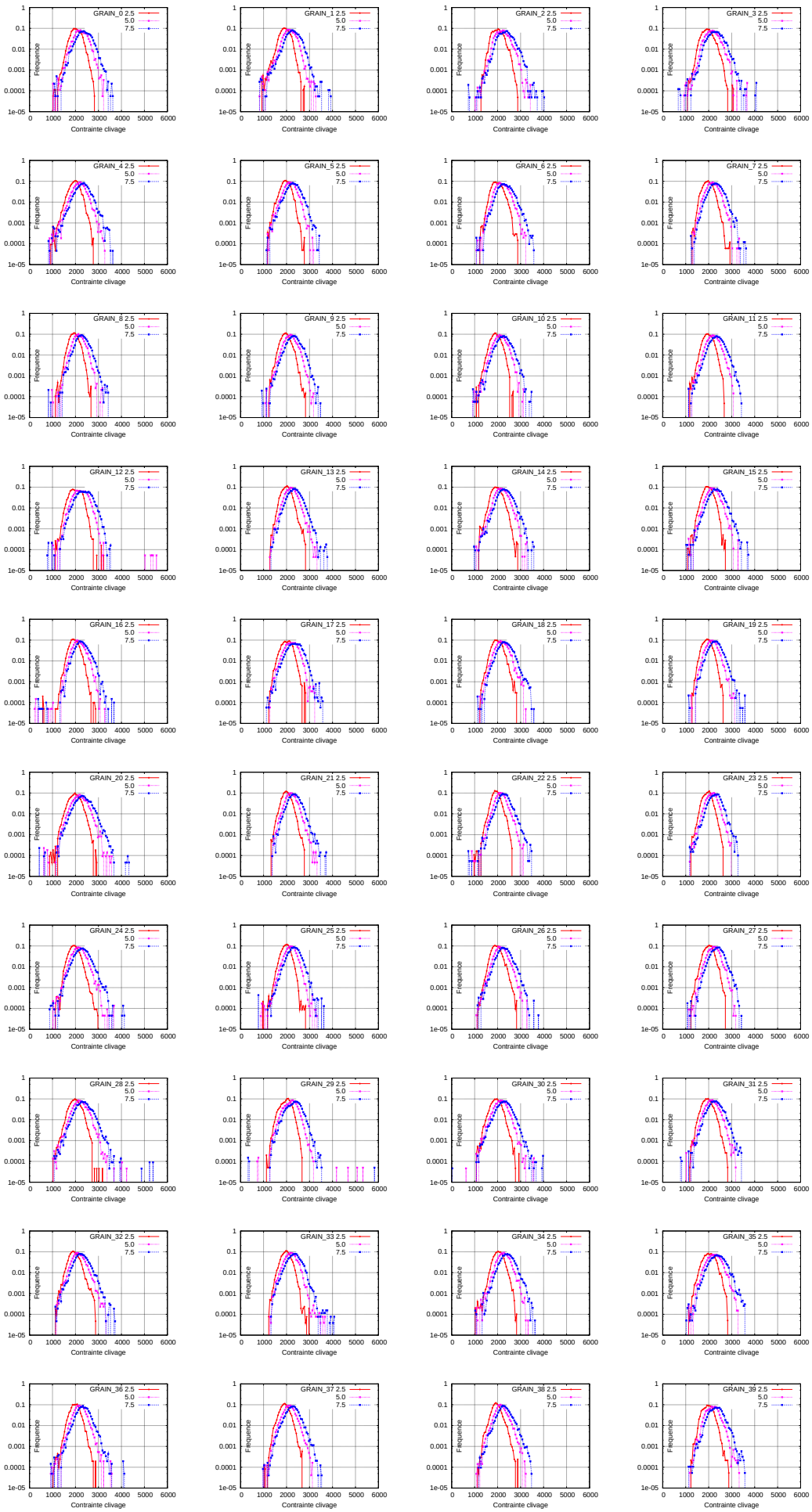


FIG. *A.101. Distribution de contrainte clivage dans les GRAINS (MPa)*

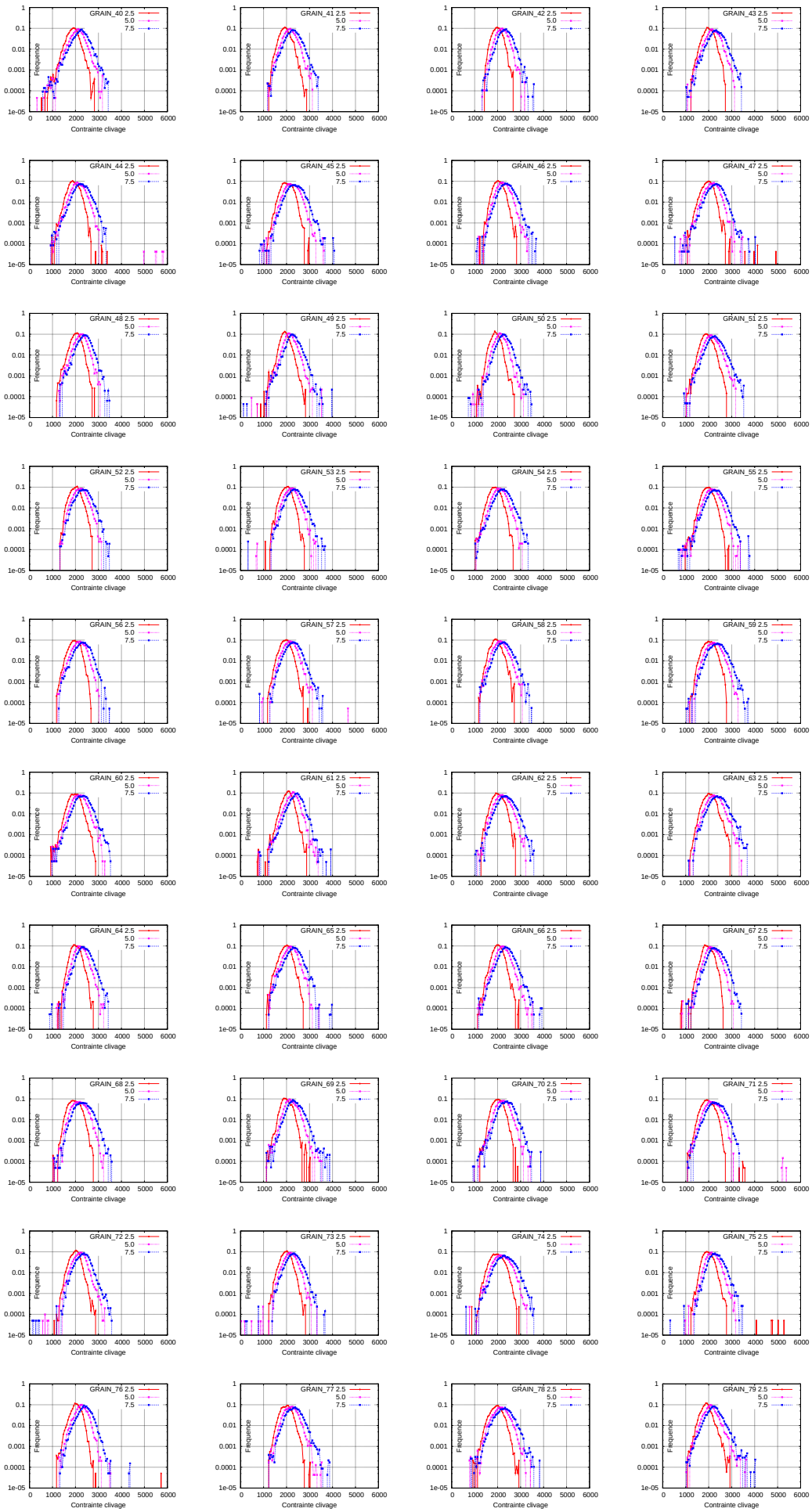


FIG. *A.102. Distribution de contrainte clivage dans les GRAINS (MPa)*

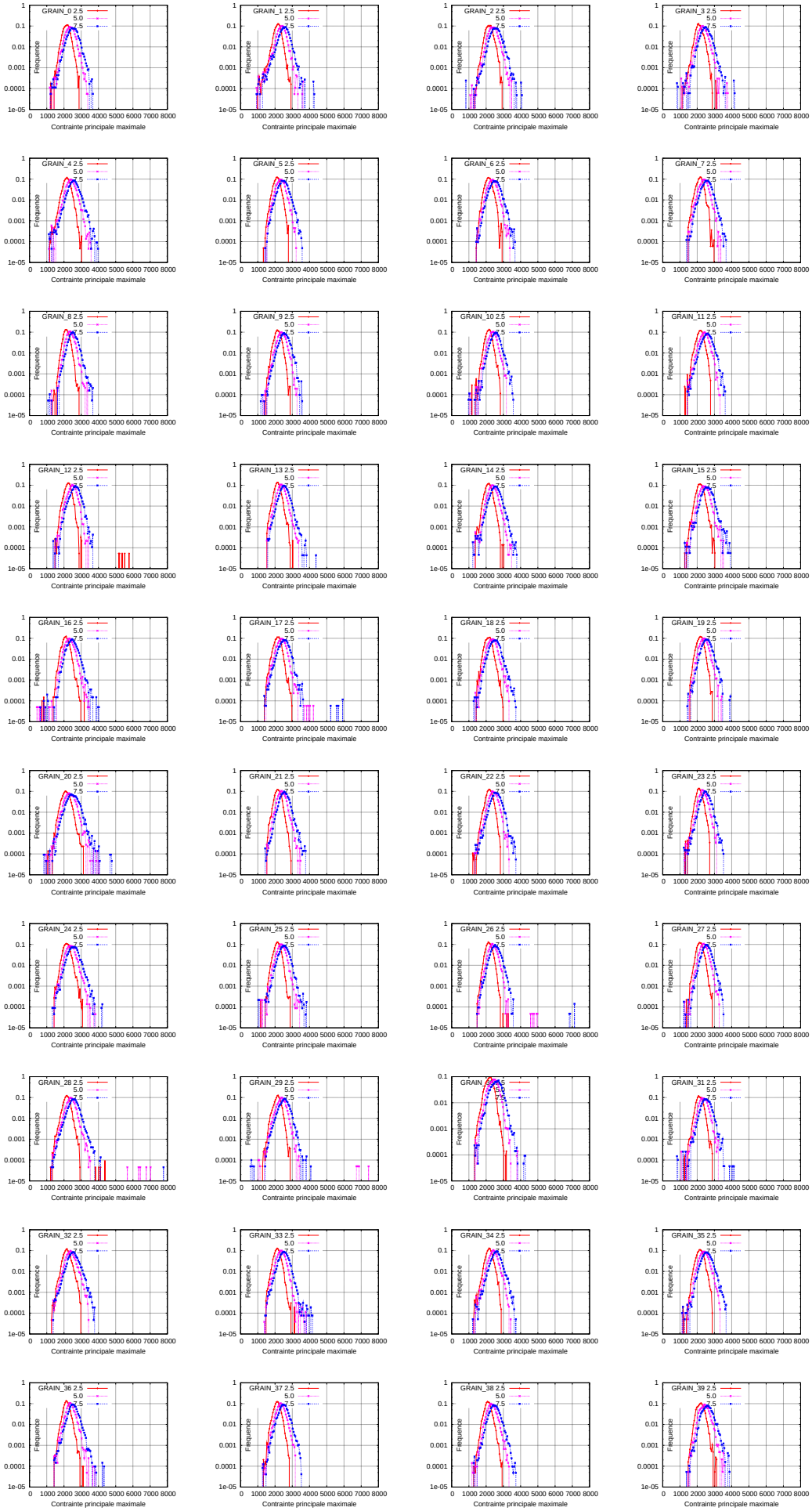


FIG. *A.103. Distribution de contrainte principale maximale dans les GRAINS (MPa)*

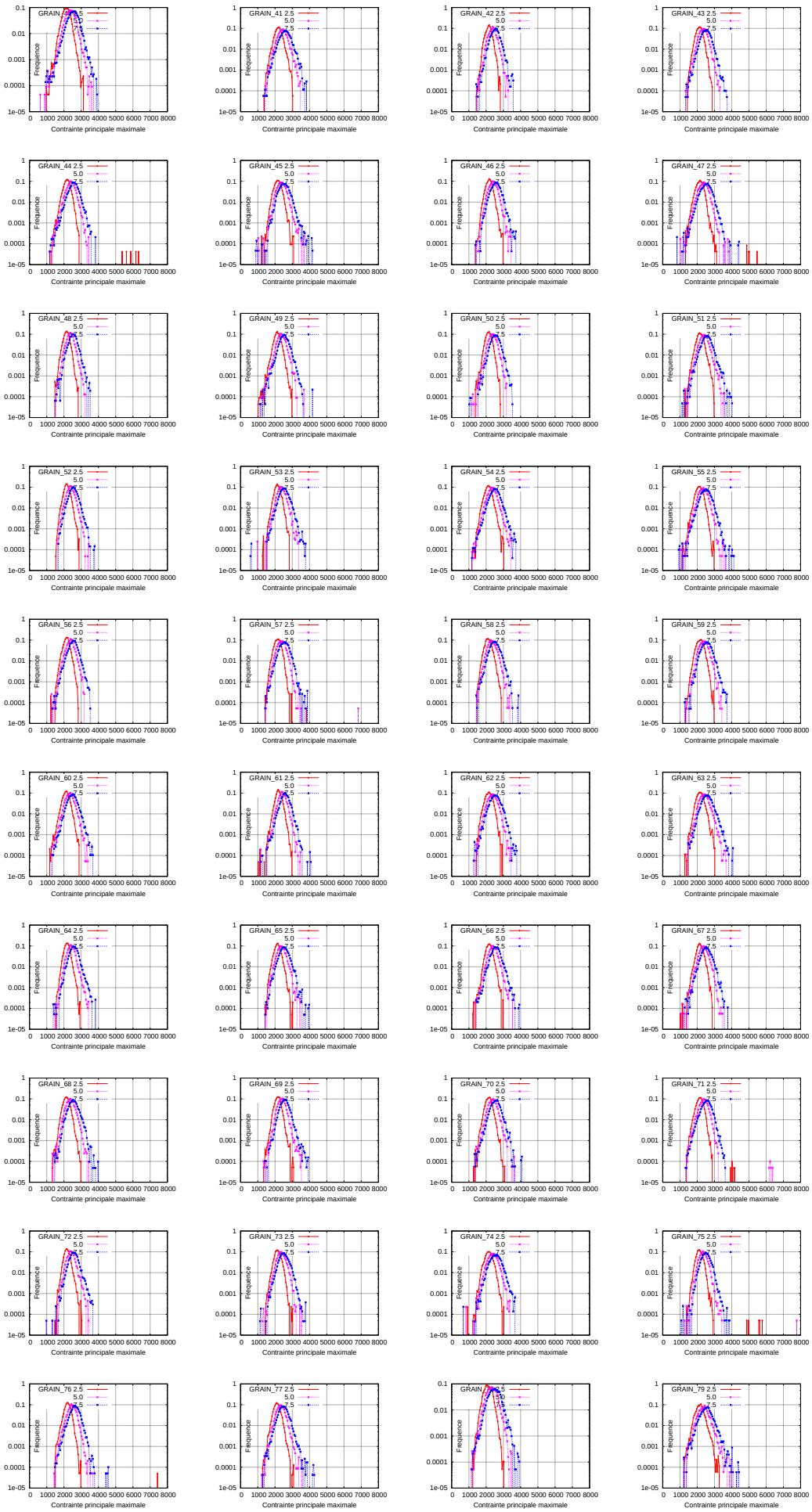


FIG. *A.104. Distribution de contrainte principale maximale dans les GRAINS (MPa)*

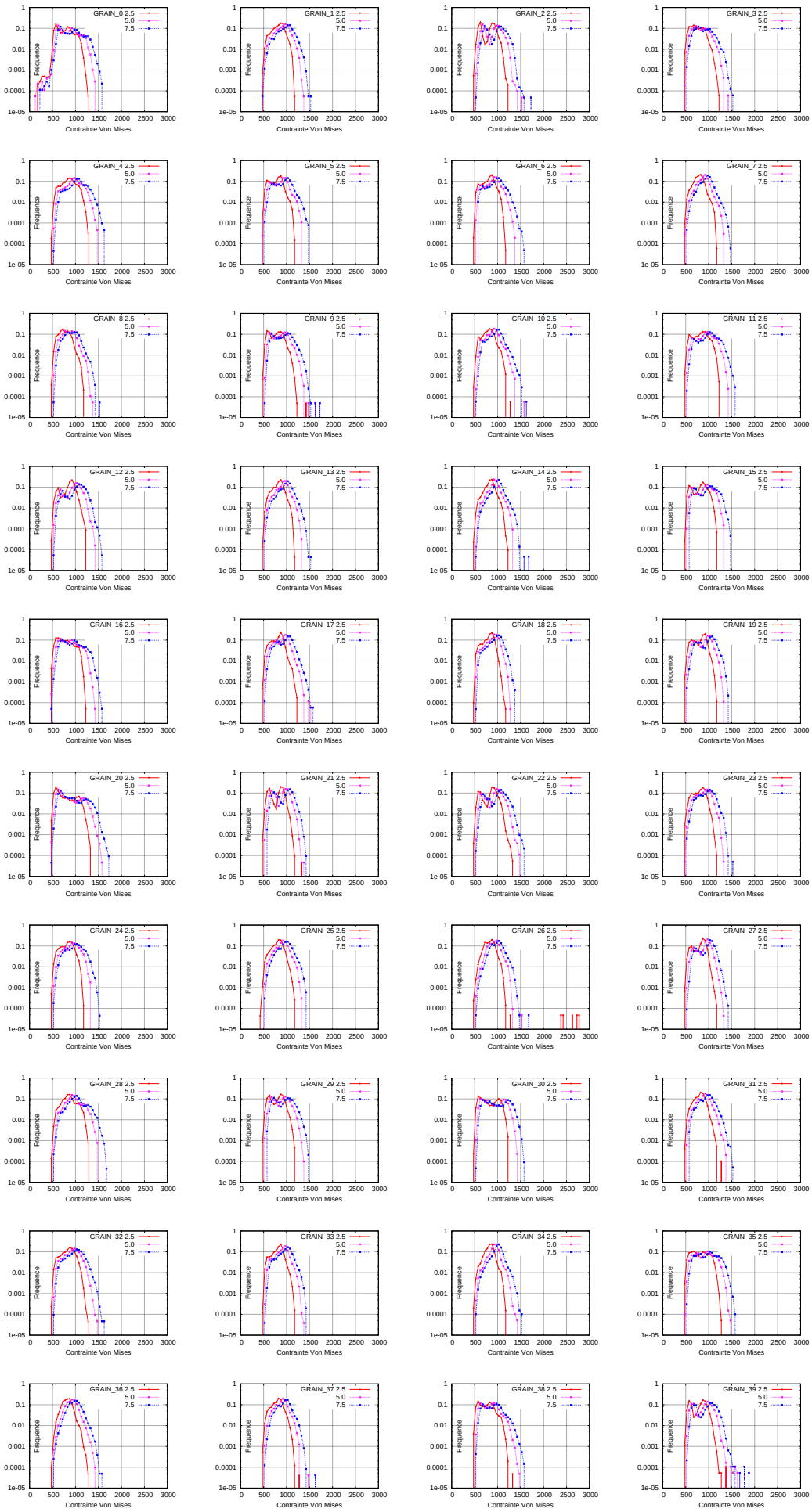


FIG. *A.105. Distribution de contrainte Von Mises dans les GRAINS (MPa)*

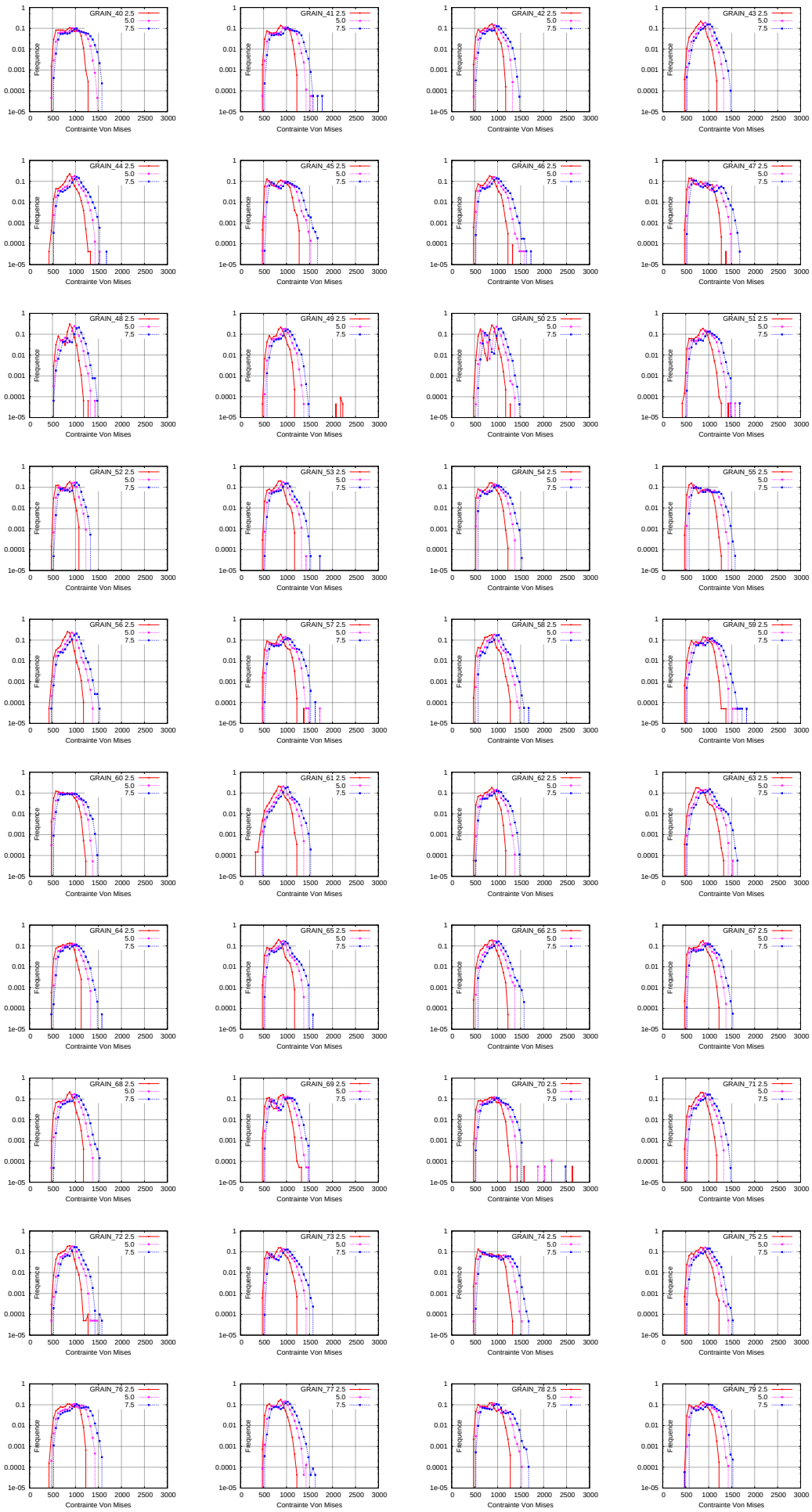


FIG. *A.106. Distribution de contrainte Von Mises dans les GRAINS (MPa)*

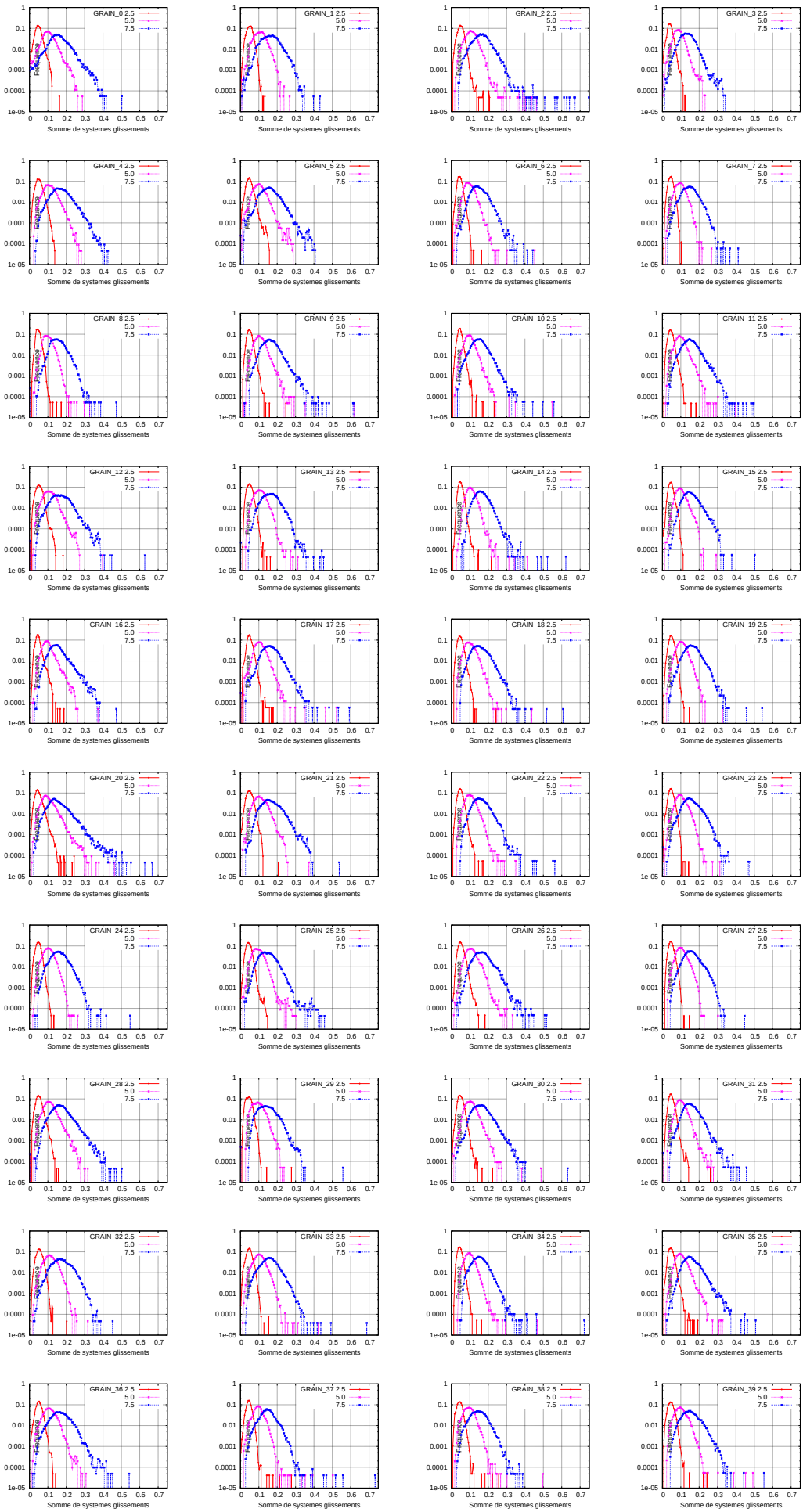


FIG. *A.107. Distribution de la somme de glissements des systèmes dans les GRAINS*

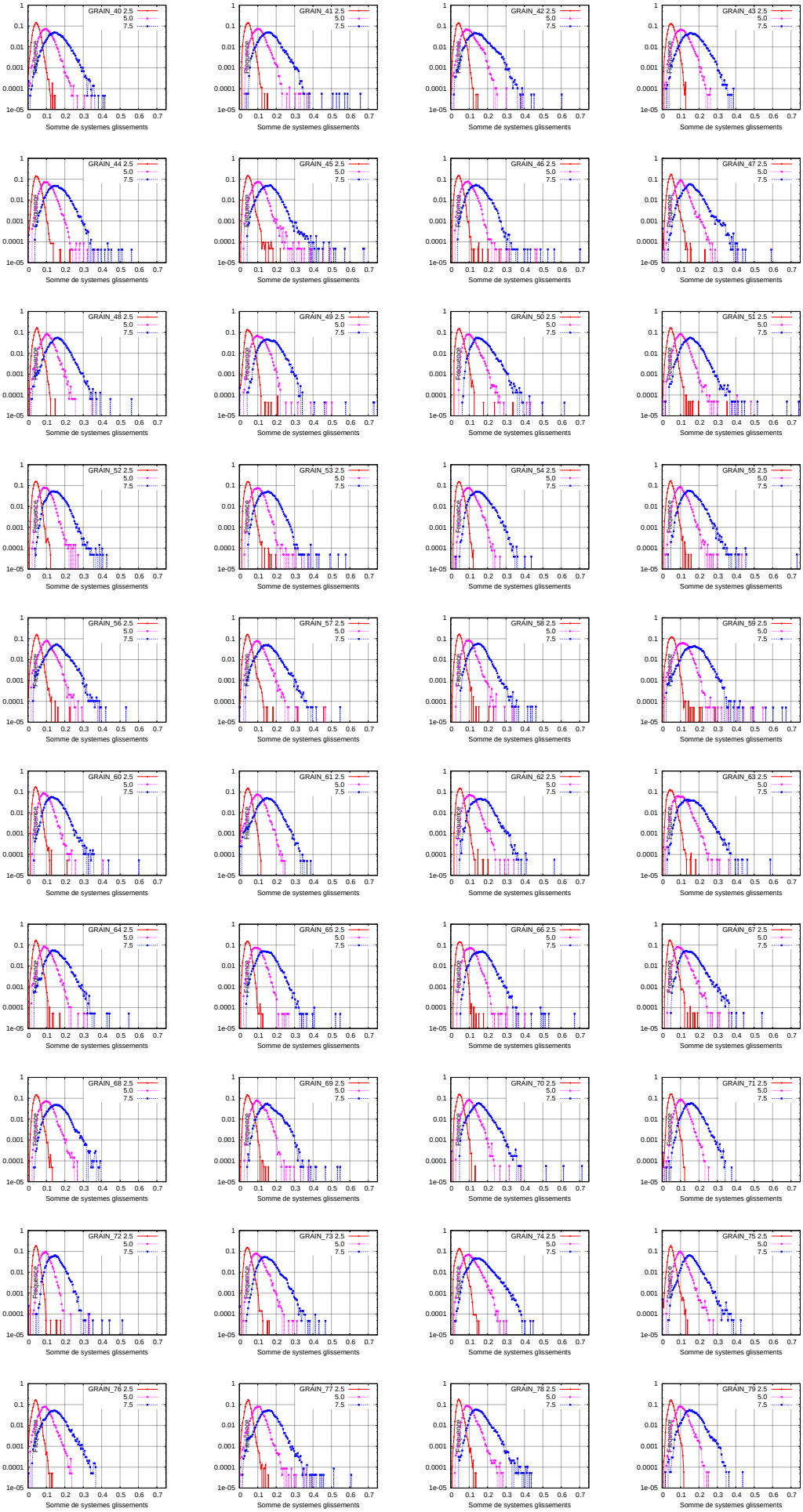


FIG. *A.108. Distribution de la somme de glissements des systèmes dans les GRAINS*

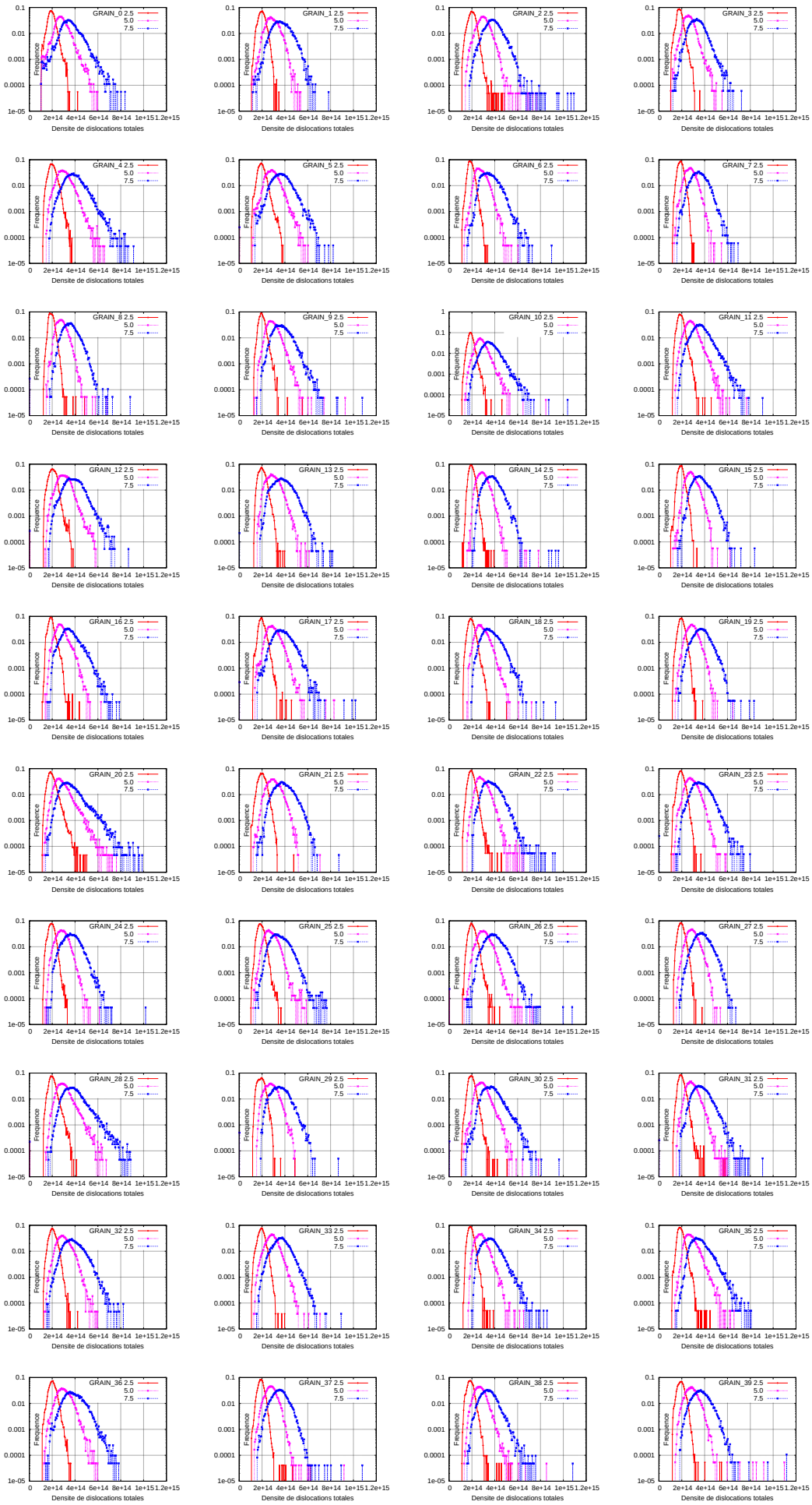


FIG. *A.109. Distribution de la densité de dislocations totales dans les GRAINS*

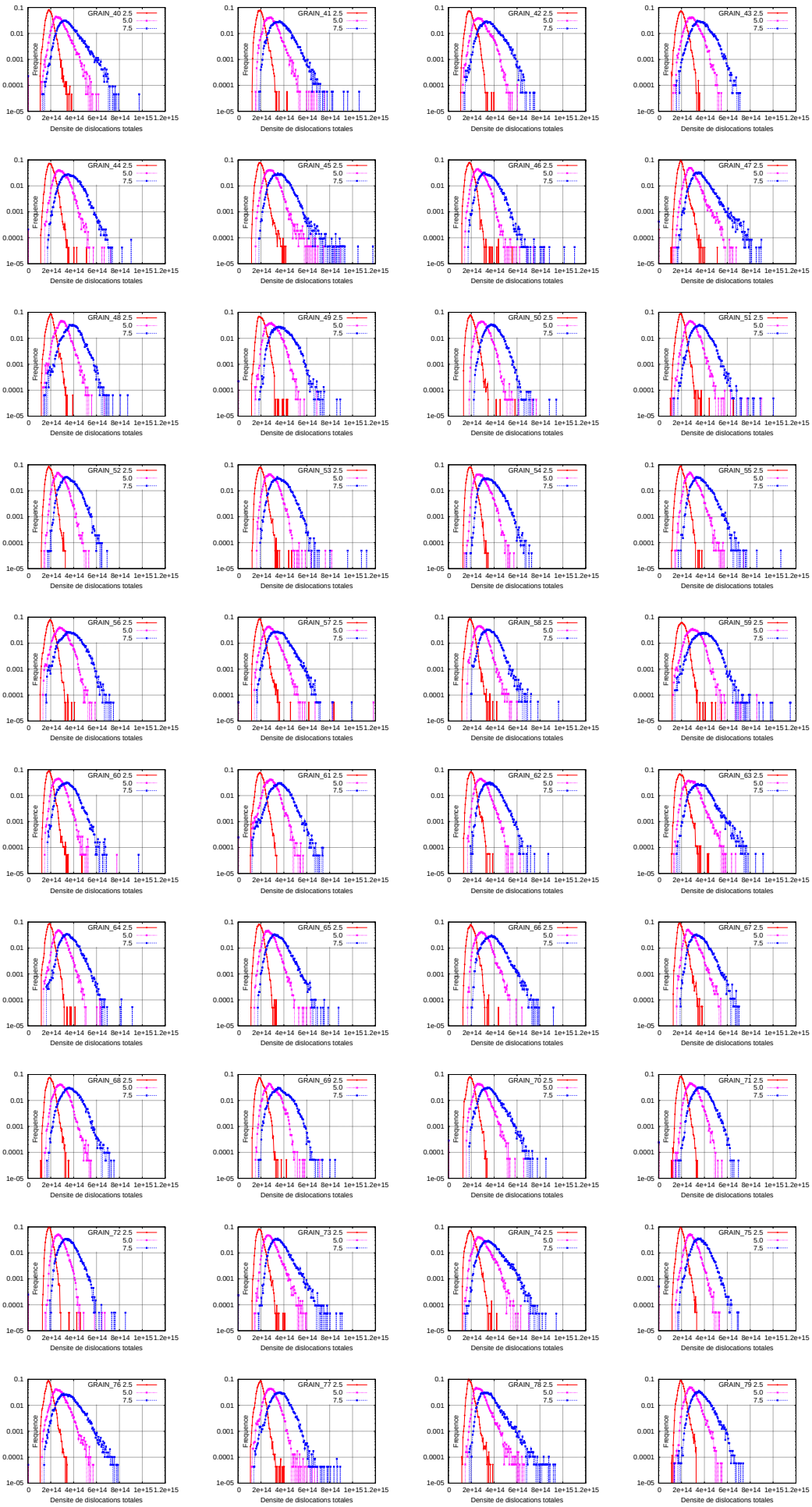


FIG. *A.110. Distribution de la densité de dislocations totales dans les GRAINS*

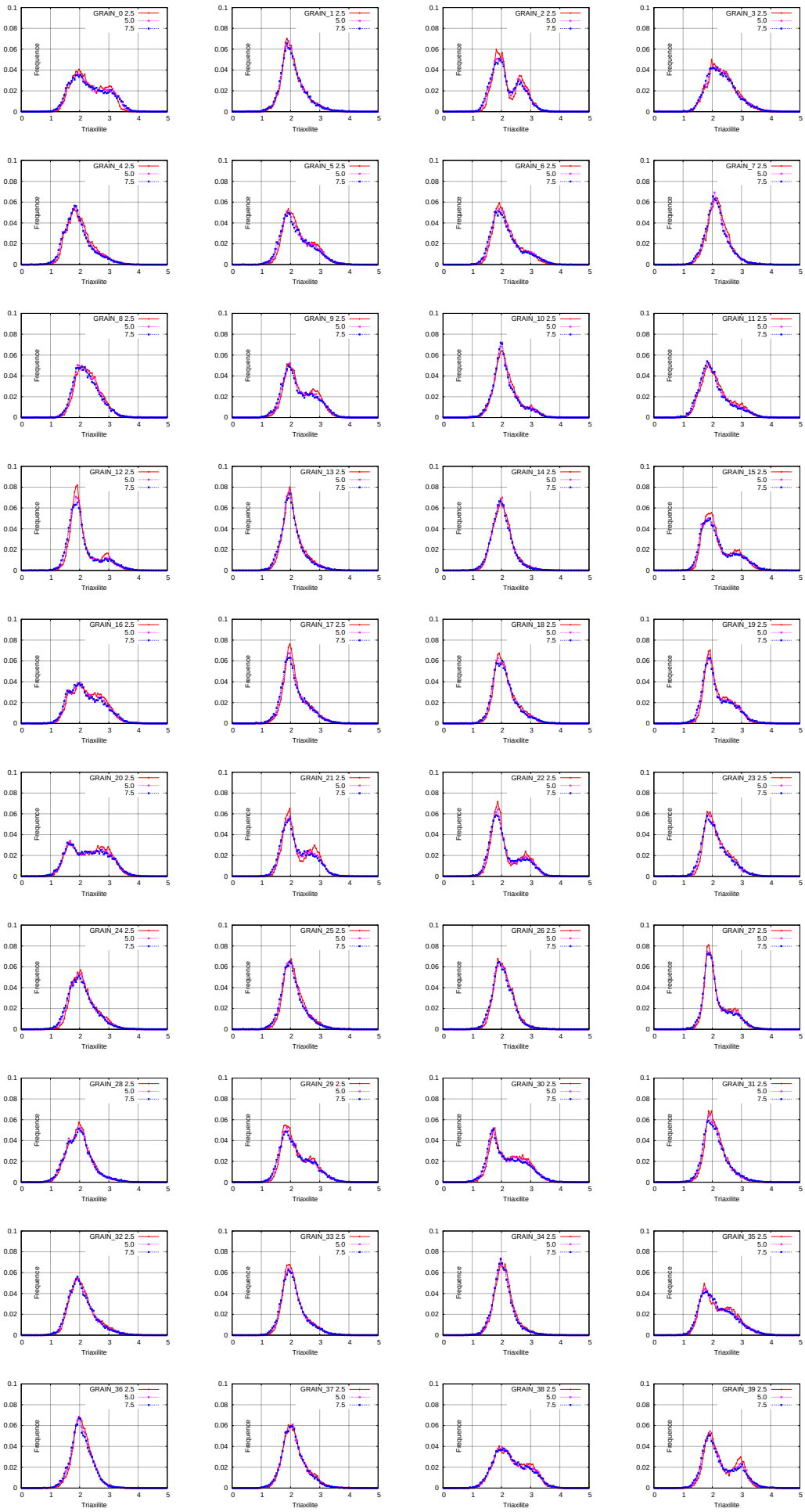


FIG. *A.111. Distribution de la triaxilité dans les GRAINS*

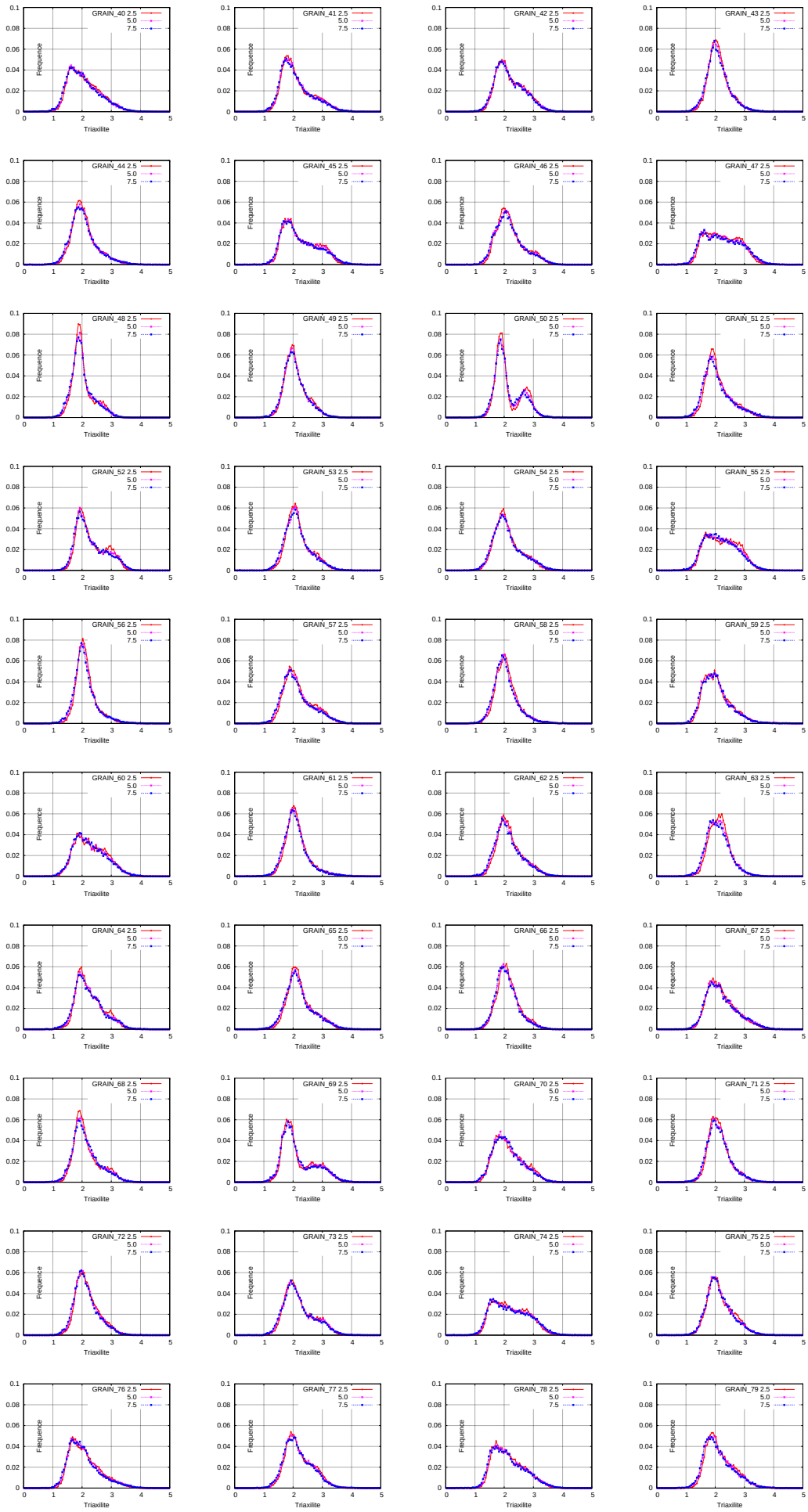


FIG. *A.112. Distribution de la triaxilité dans les GRAINS*

A.3 Comparaison des matériaux irradié et non irradié

A.3.1 Matériaux irradié et non irradié à température 25°C

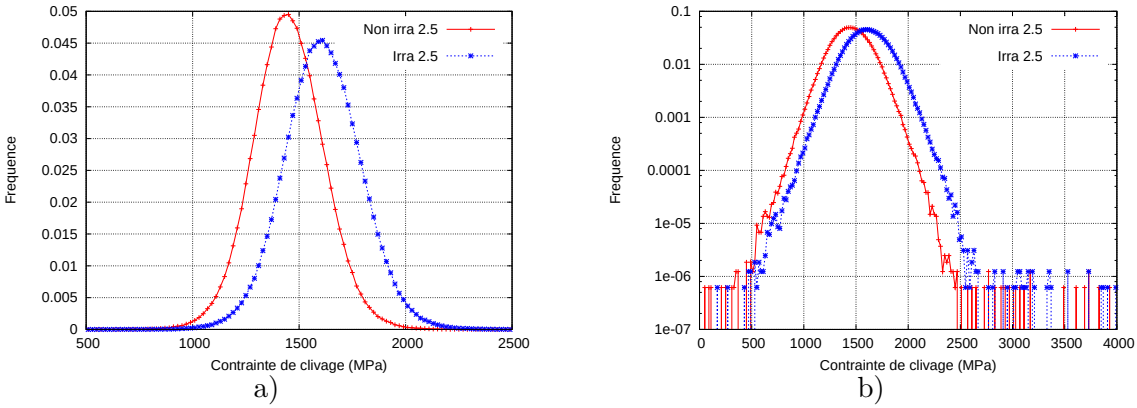


FIG. *A.113. Distribution de contrainte de clivage au 2.5% déformation équivalente*

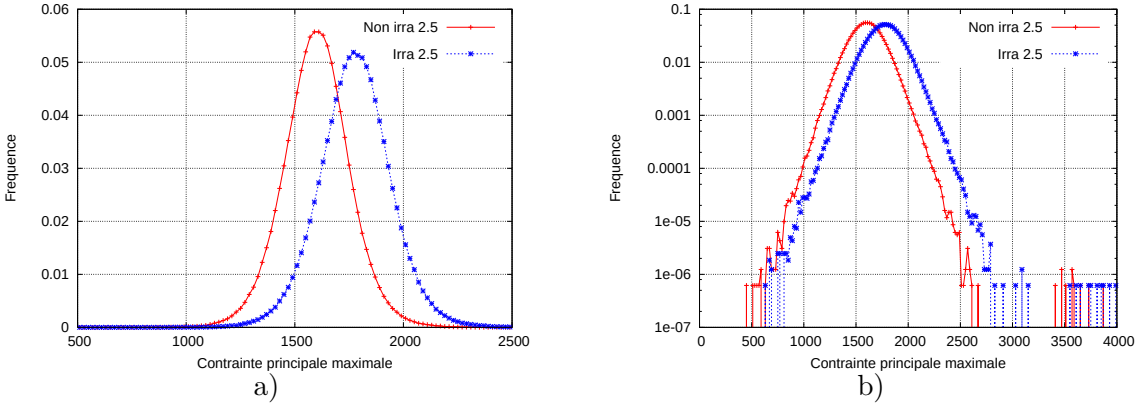


FIG. *A.114. Distribution de contrainte principale maximale au 2.5% déformation équivalente*

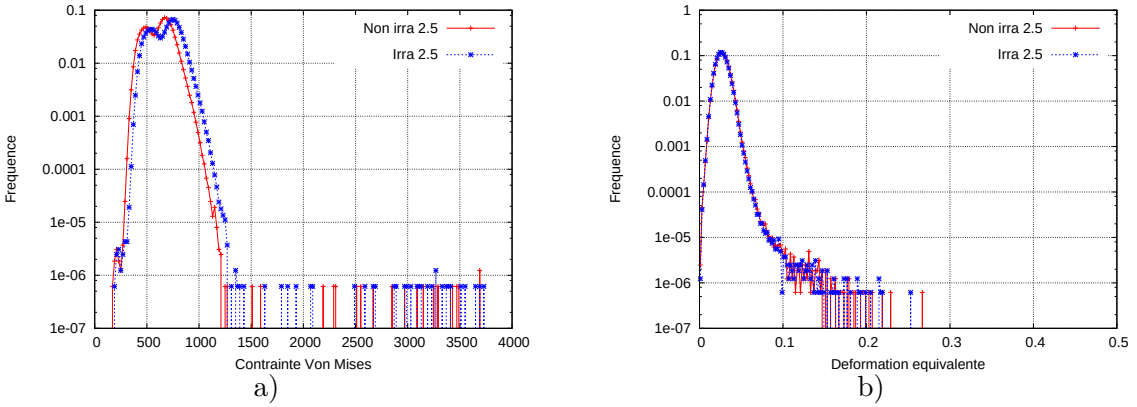
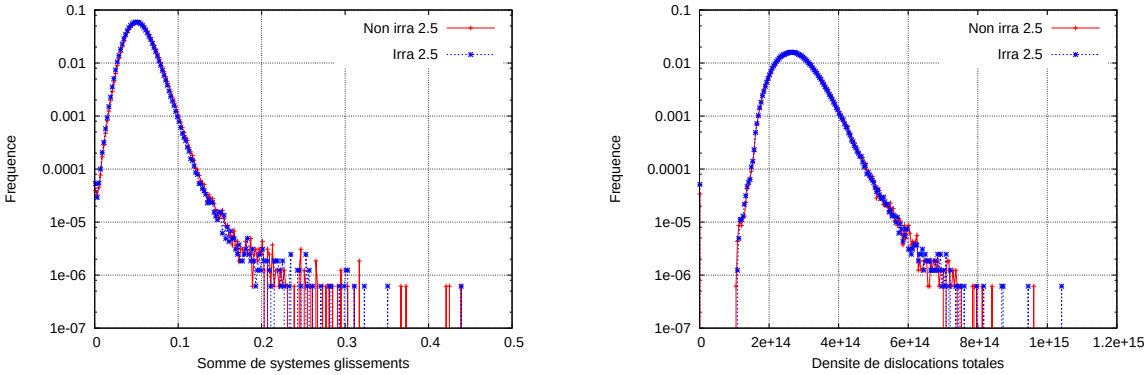


FIG. *A.115. Distribution de contrainte Von Mises a) et déformation équivalente b) au 2.5% déformation équivalente*



a) b)

FIG. *A.116. Distributions de la somme de systèmes glissement a) et la densité de dislocations totale b) au 2.5 % déformation équivalente*

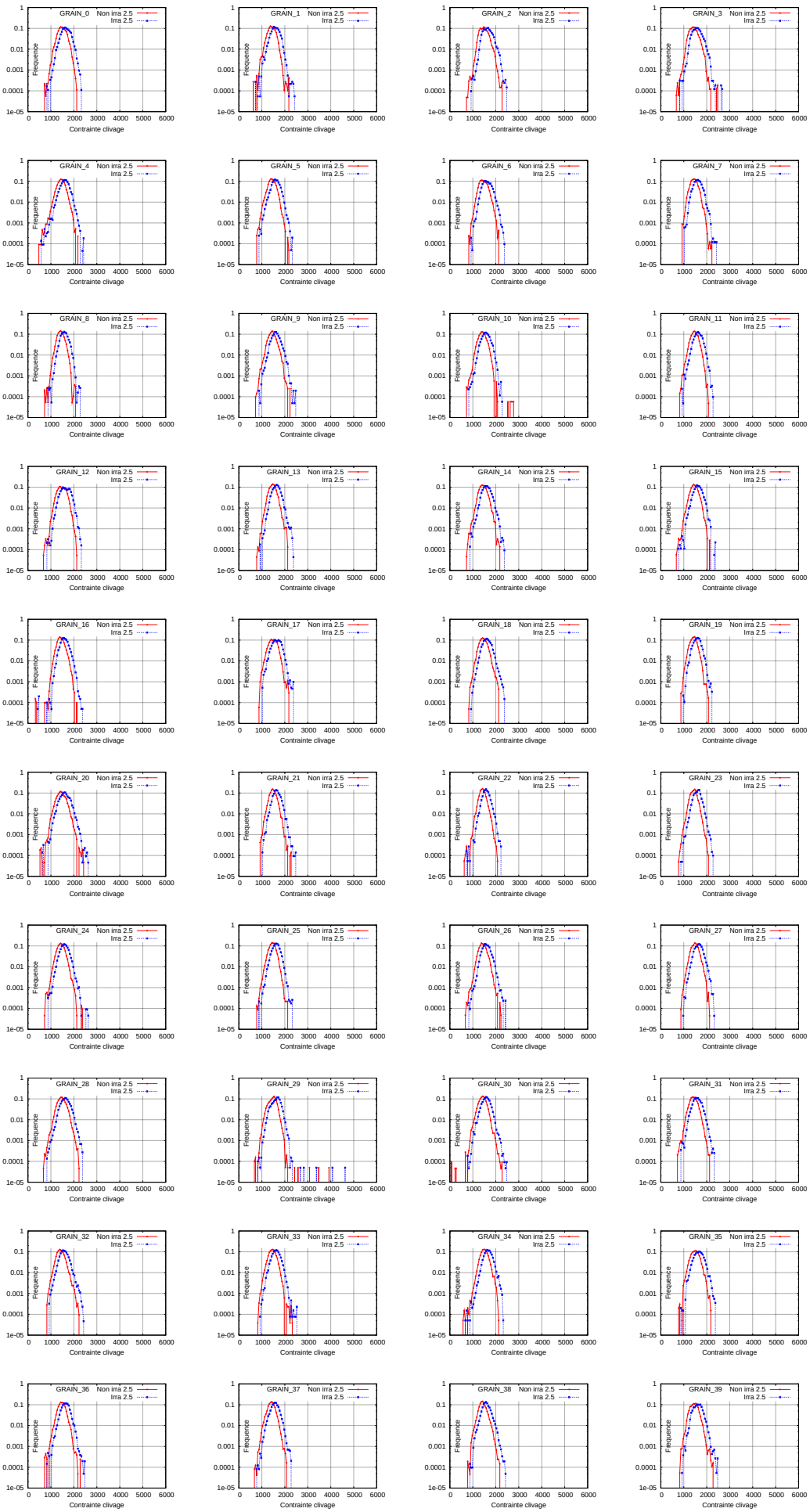


FIG. *A.117. Distribution de contrainte clivage dans les GRAINS (MPa)*

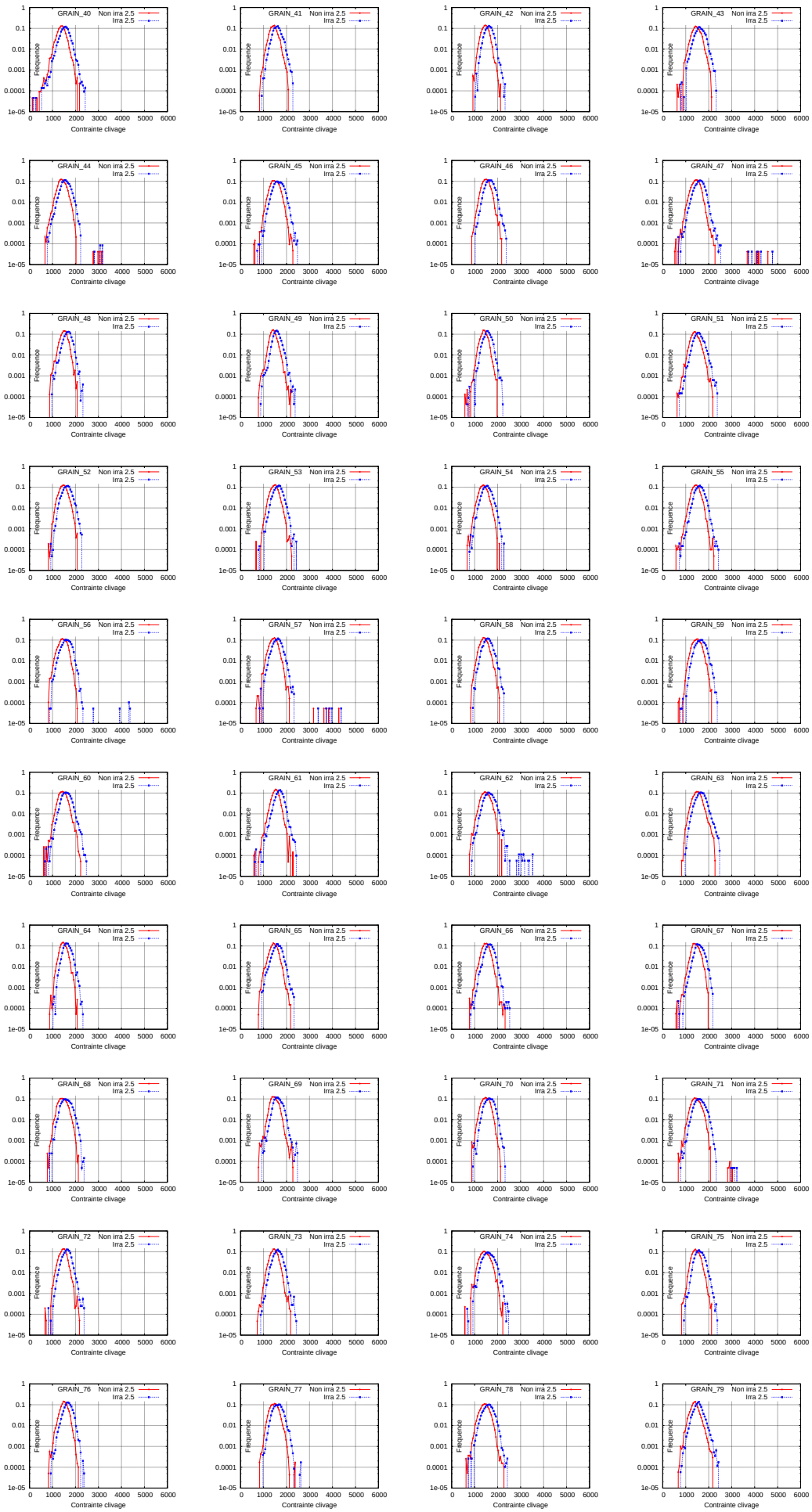


FIG. *A.118. Distribution de contrainte clivage dans les GRAINS (MPa)*

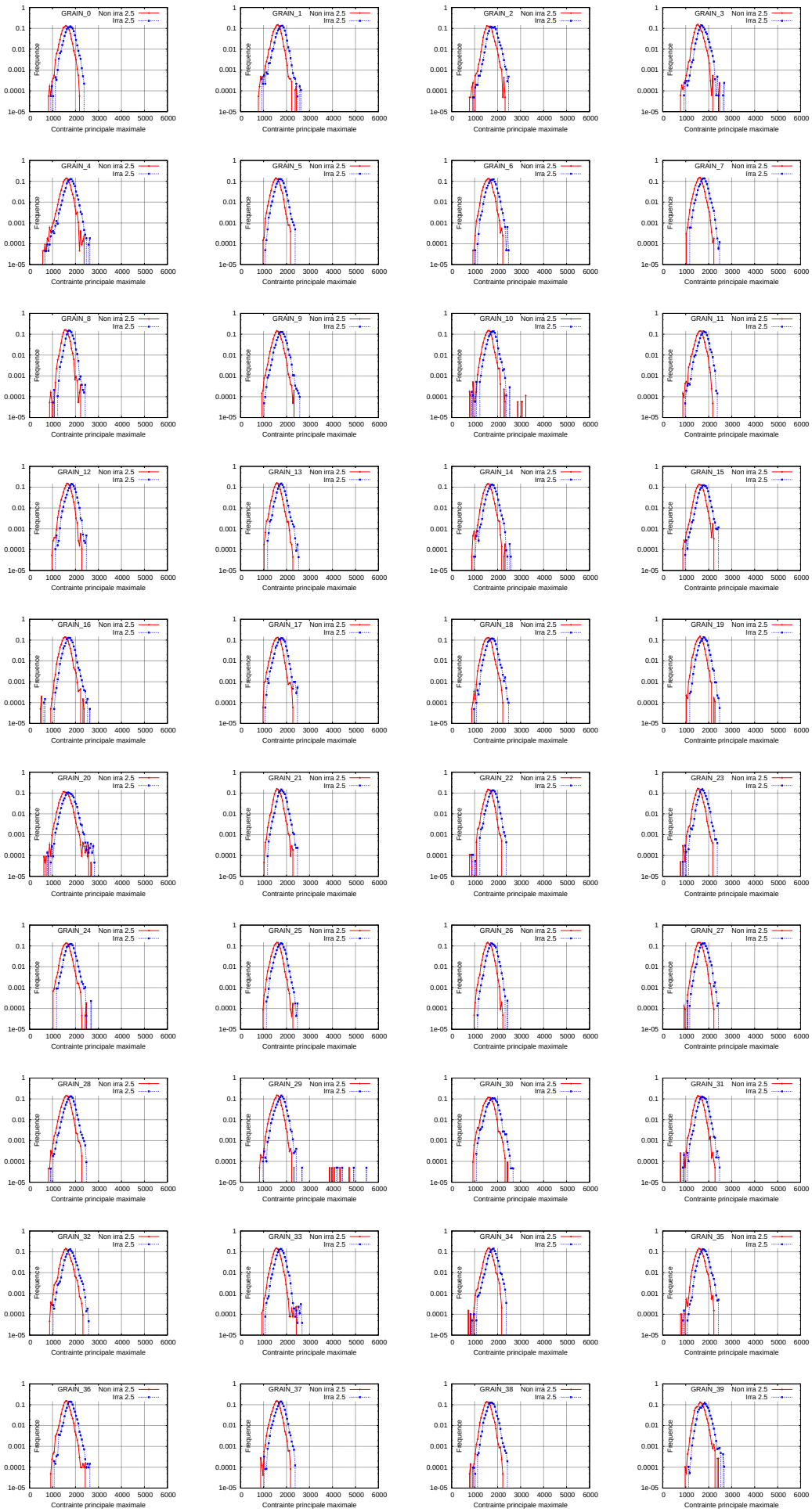


FIG. *A.119. Distribution de contrainte principale maximale dans les GRAINS (MPa)*

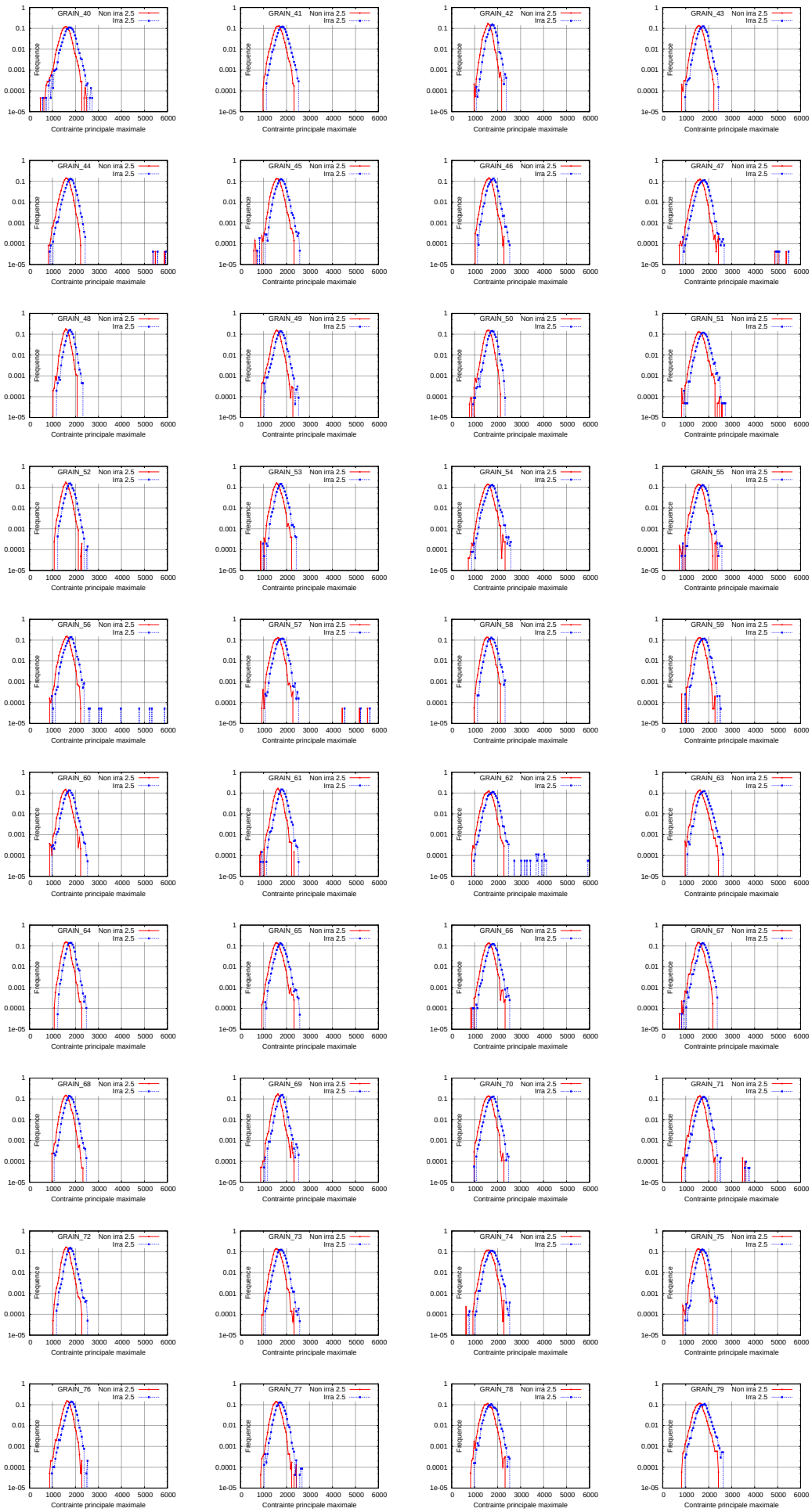


FIG. *A.120. Distribution de contrainte principale maximale dans les GRAINS (MPa)*

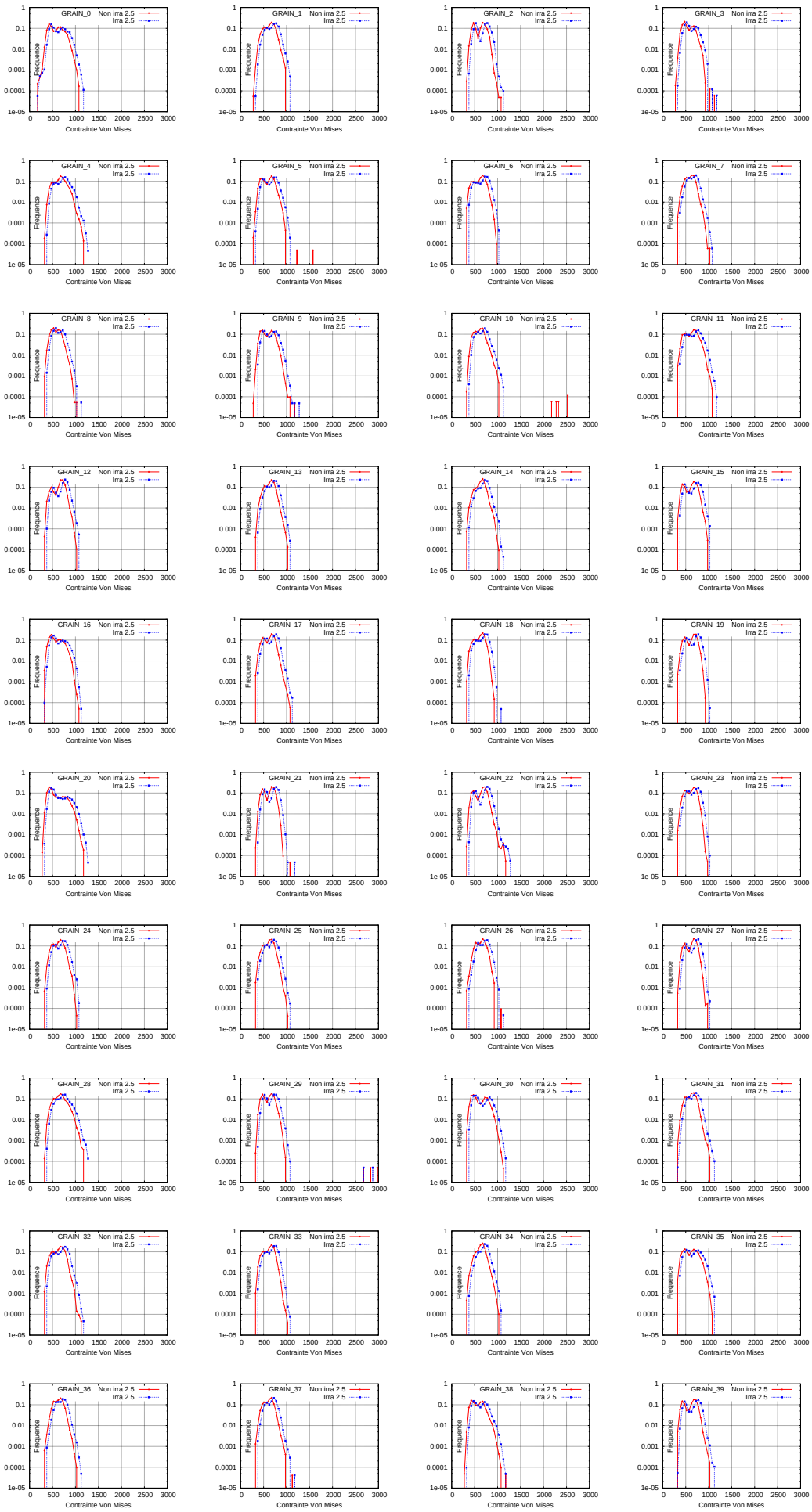


FIG. *A.121. Distribution de contrainte Von Mises dans les GRAINS (MPa)*

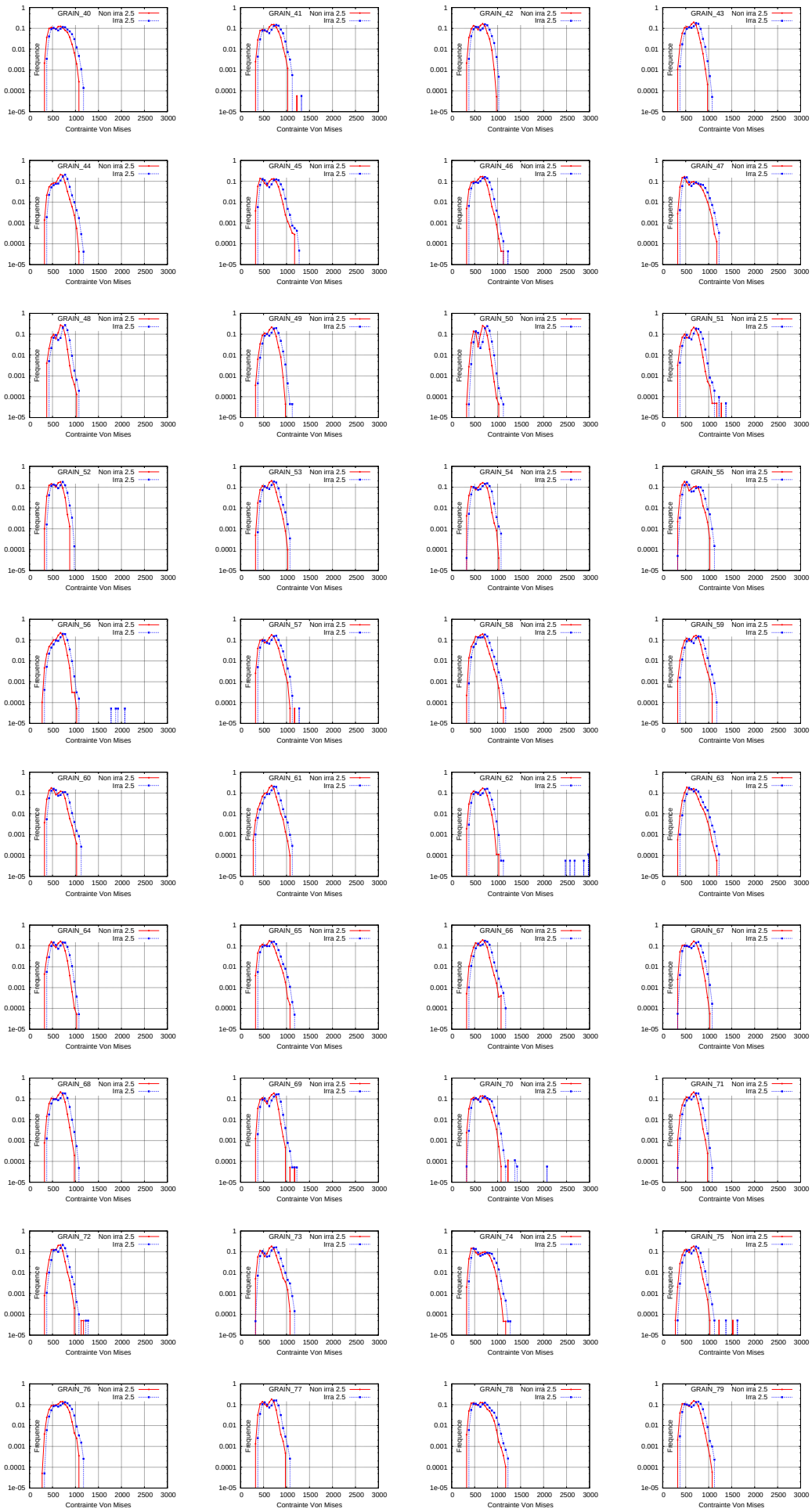


FIG. *A.122. Distribution de contrainte Von Mises dans les GRAINS (MPa)*

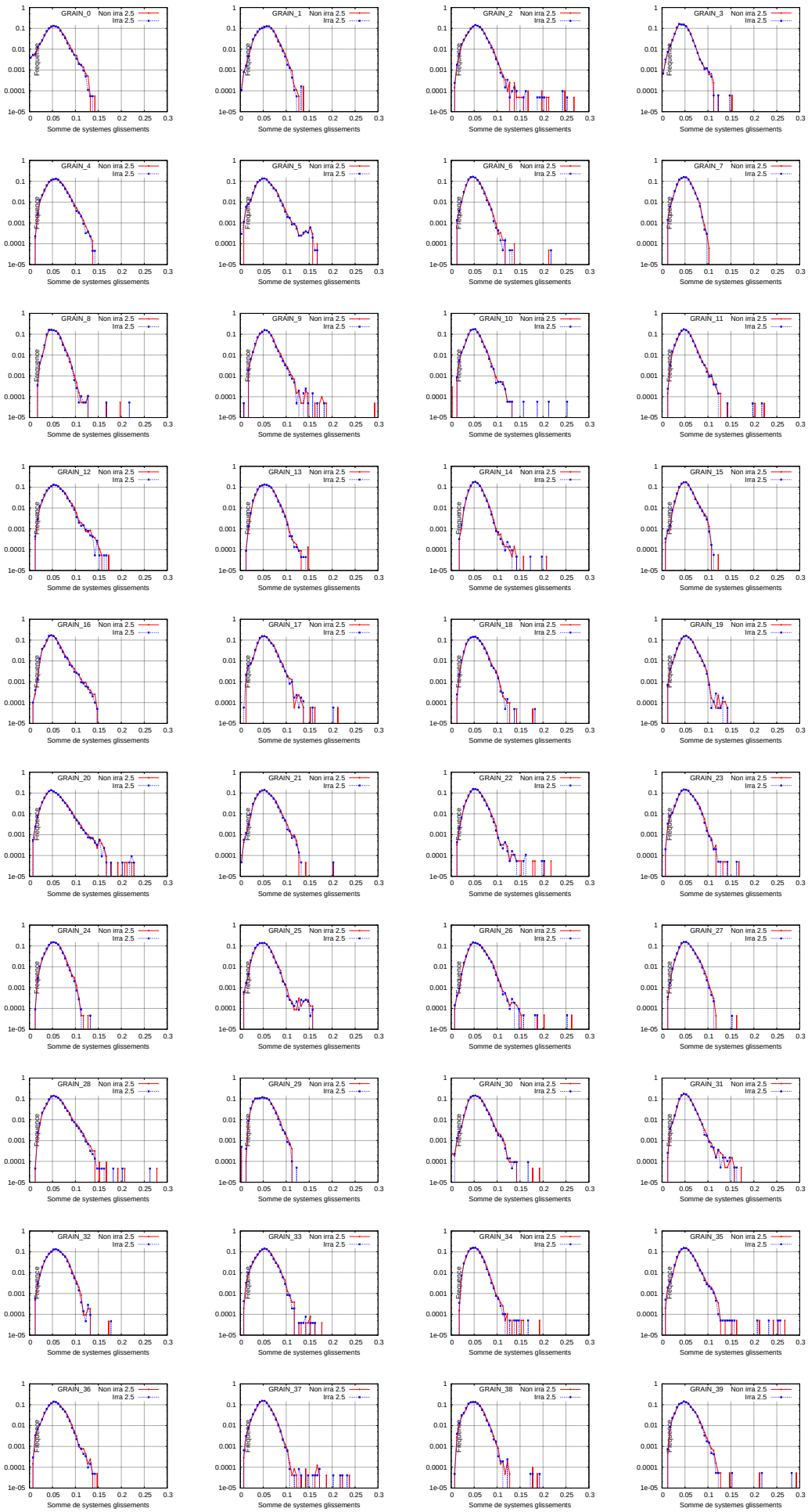


FIG. *A.123. Distribution de la somme de glissements des systèmes dans les GRAINS*

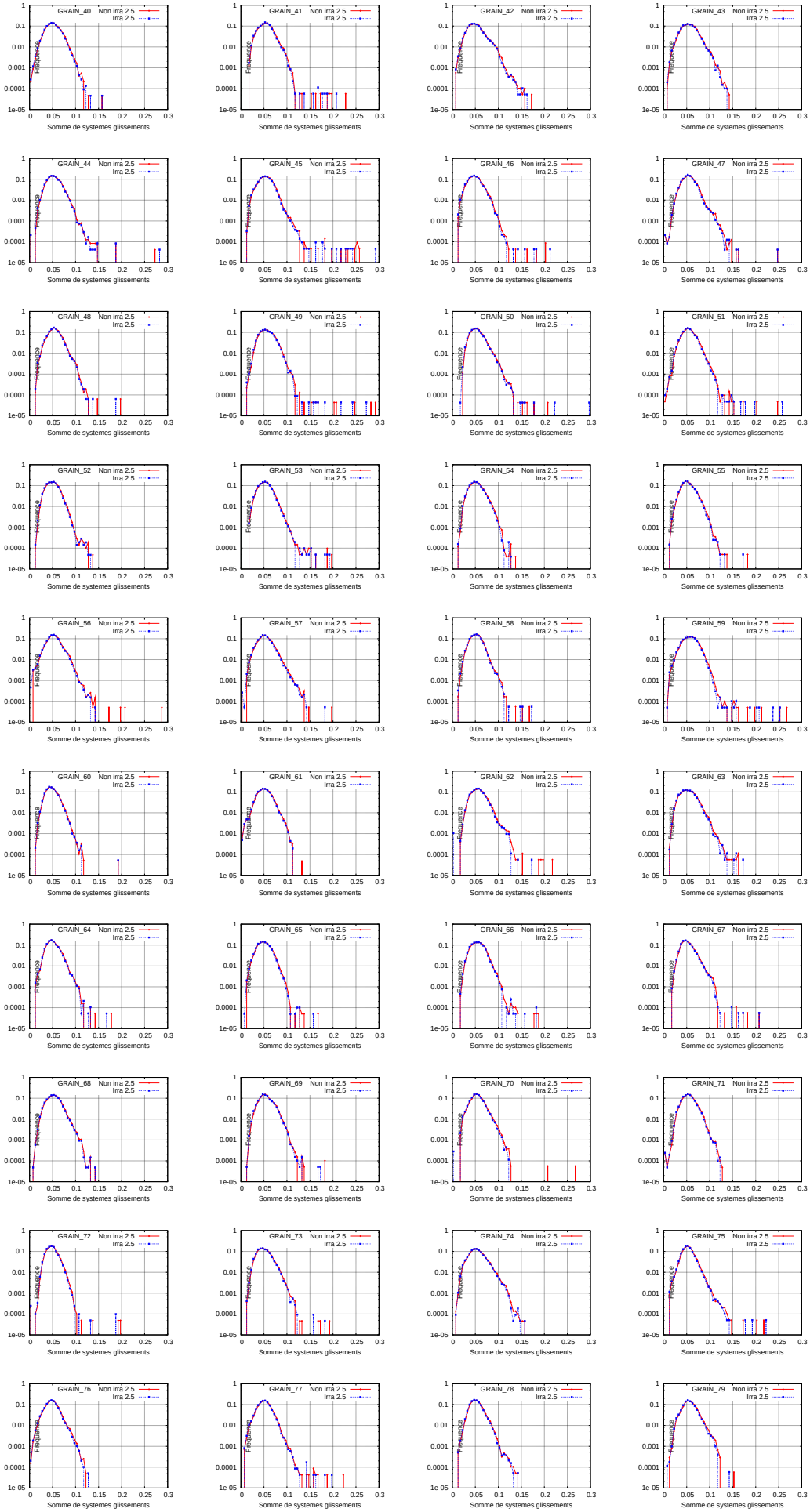


FIG. *A.124. Distribution de la somme de glissements des systèmes dans les GRAINS*

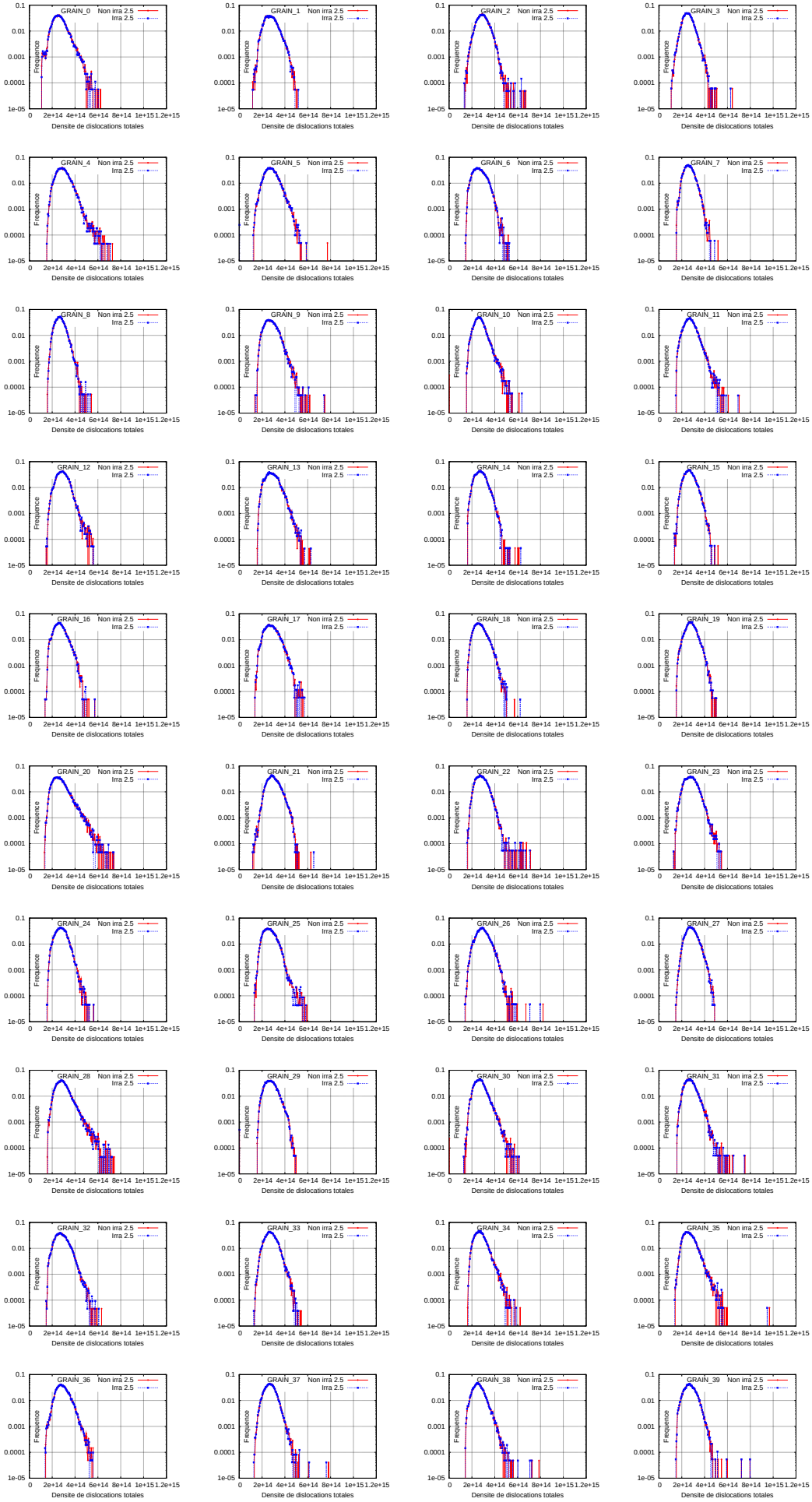


FIG. *A.125. Distribution de la densité de dislocations totales dans les GRAINS*

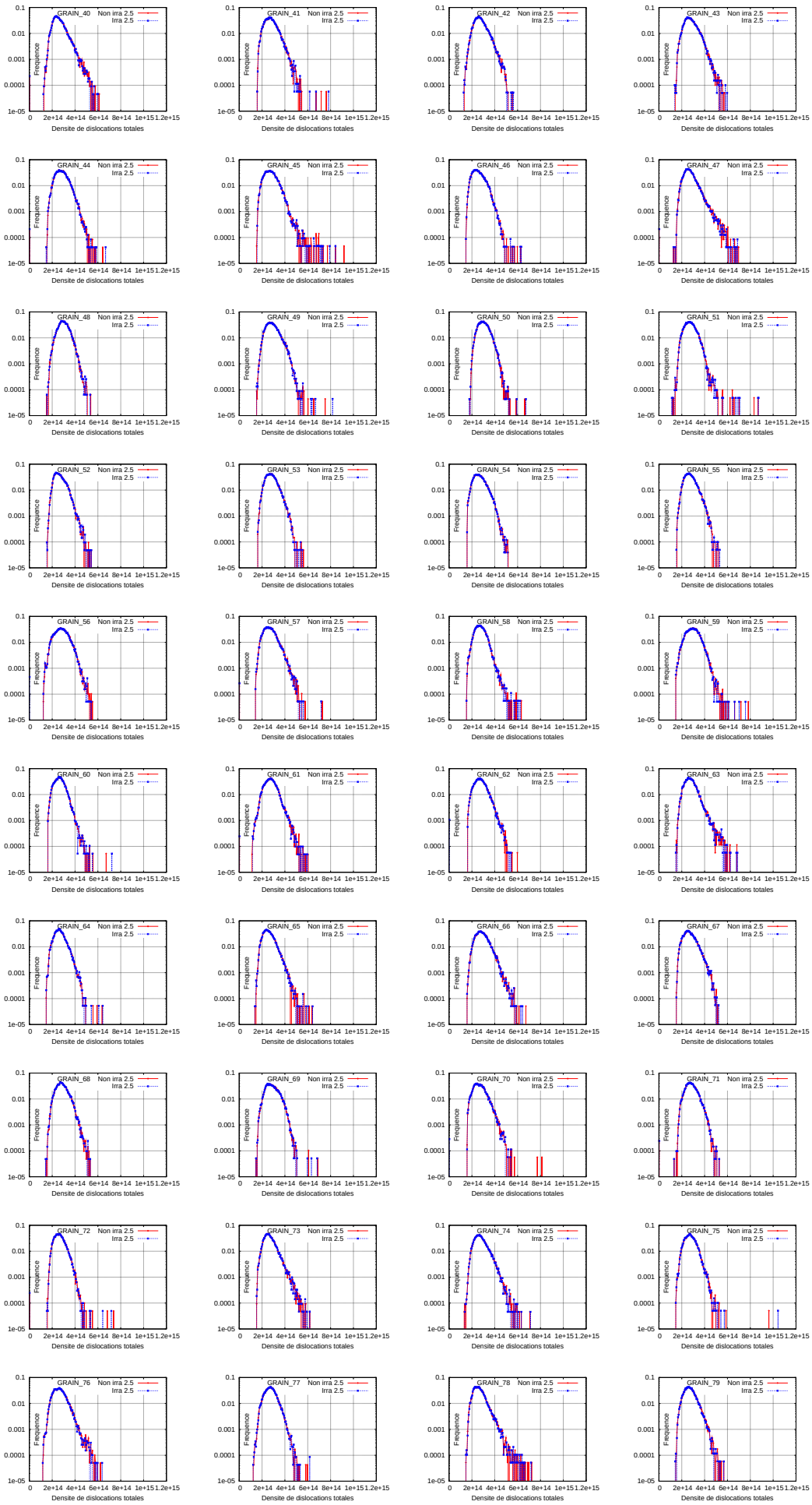


FIG. *A.126. Distribution de la densité de dislocations totales dans les GRAINS*

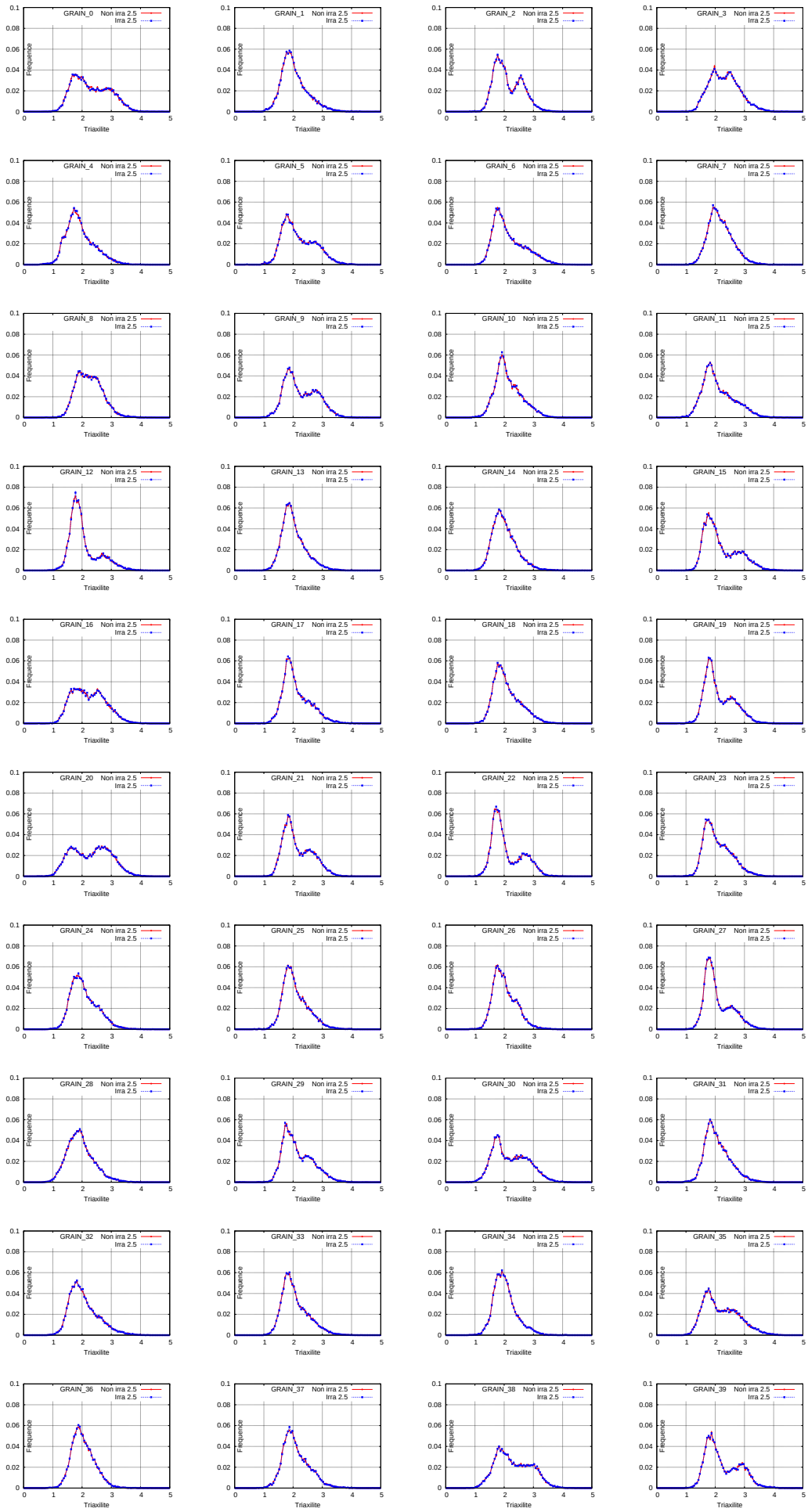


FIG. *A.127. Distribution de la triaxilité dans les GRAINS*

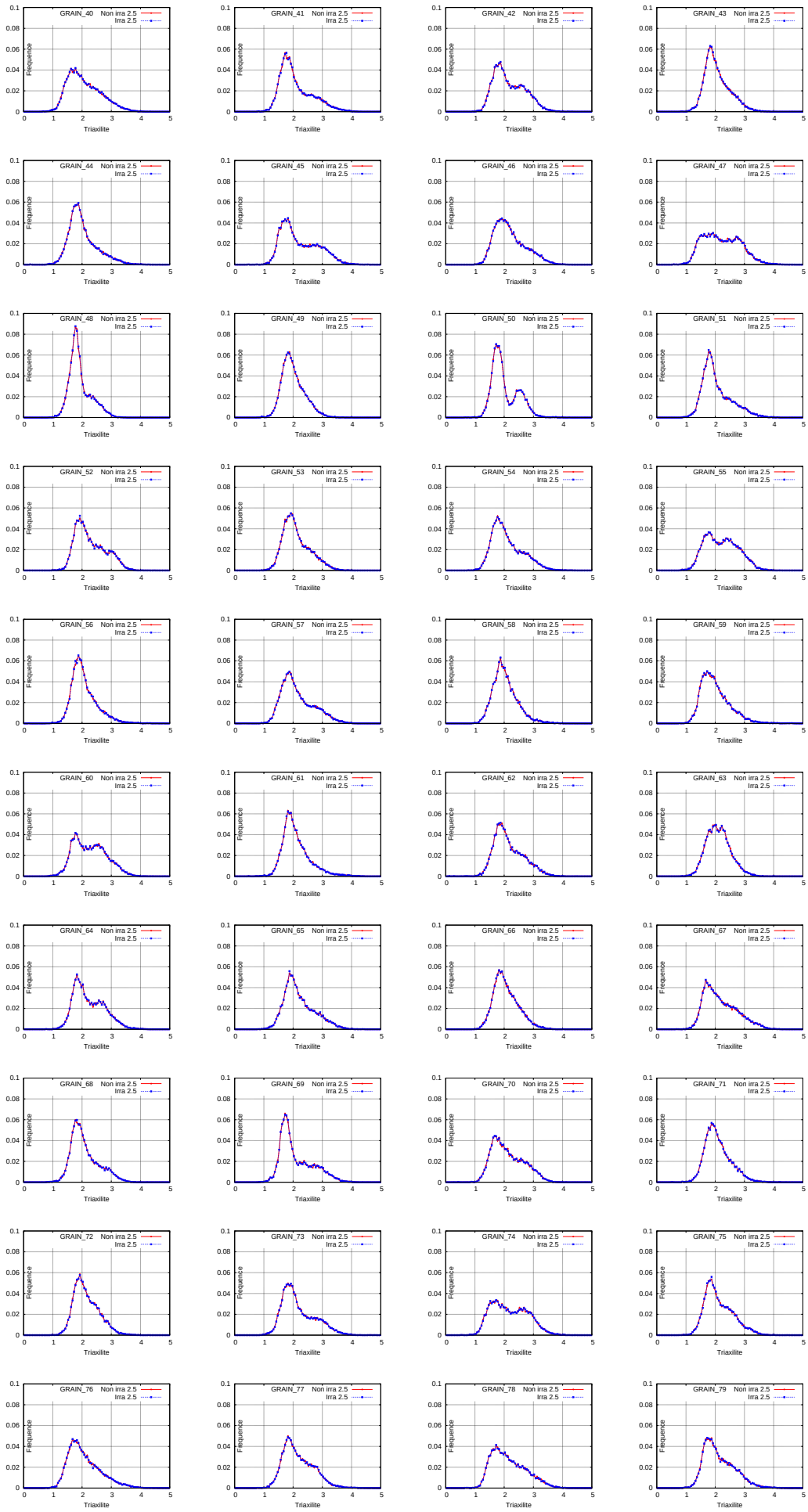


FIG. *A.128. Distribution de la triaxilité dans les GRAINS*

A.3.2 Matériaux irradié et non irradié à température −90°C aux déformations équivalentes 2.5%, 5.0%, 7.5% et 10.0%

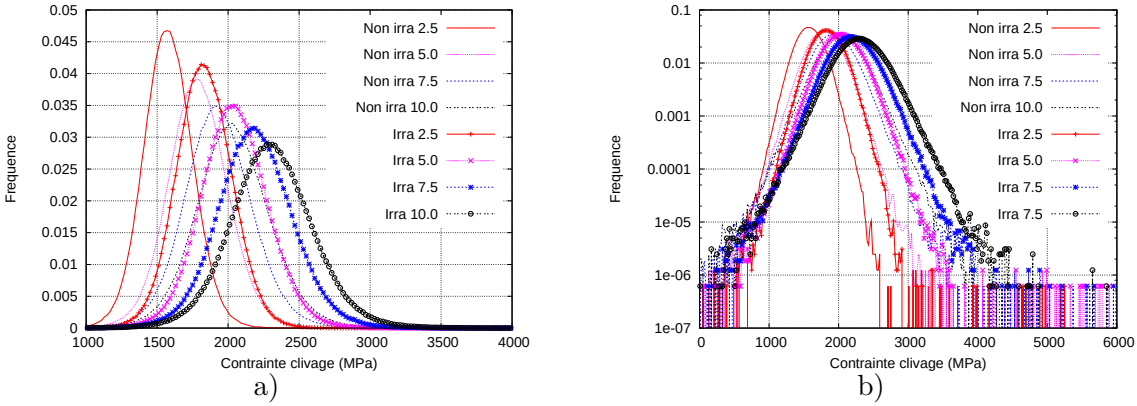


FIG. *A.129. Distribution de contrainte de clivage au 2.5%, 5.0%, 7.5% et 10.0% déformation équivalente*

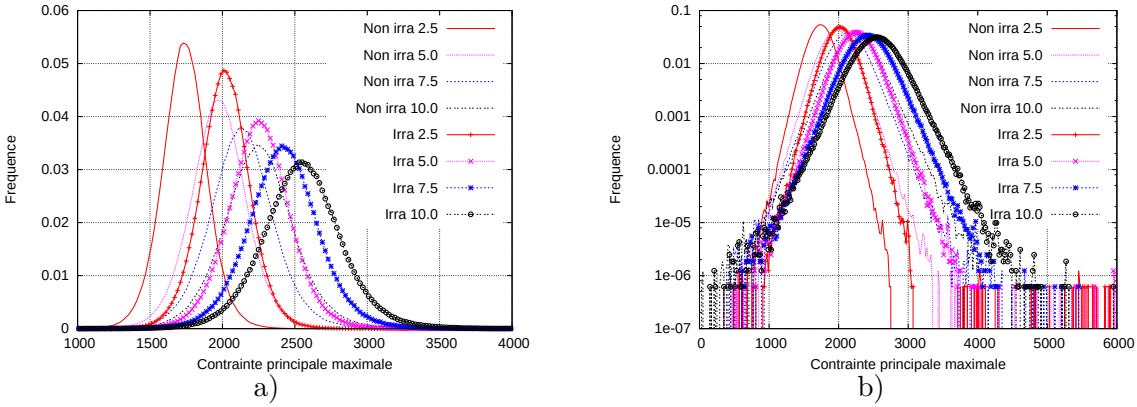


FIG. *A.130. Distribution de contrainte principale maximale au 2.5%, 5.0%, 7.5% et 10.0% déformation équivalente*

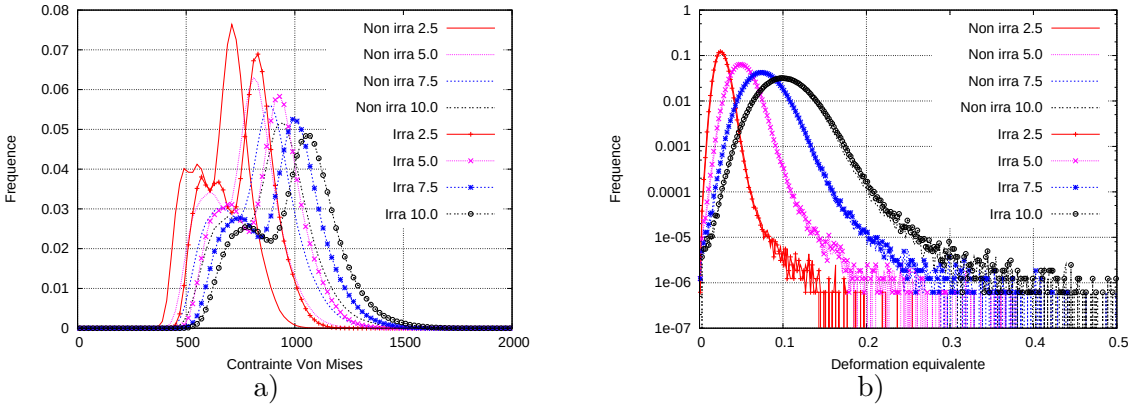
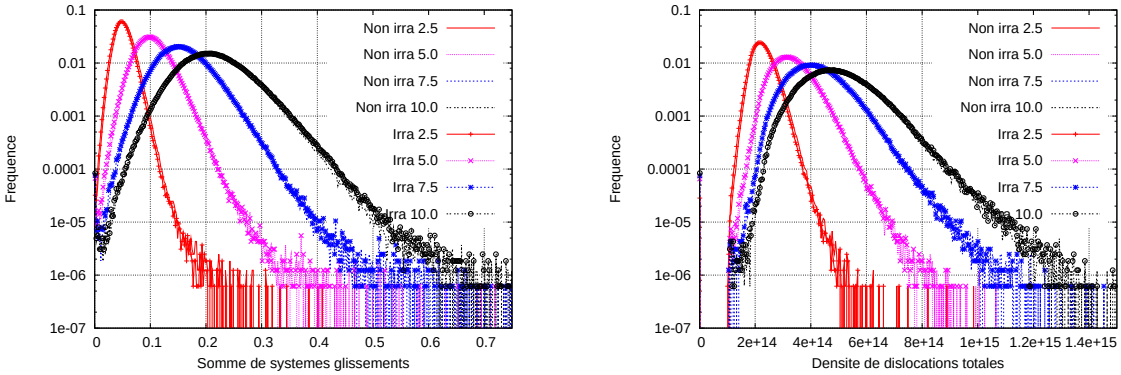


FIG. *A.131. Distribution de contrainte Von Mises a) et déformation équivalente b) au 2.5%, 5.0%, 7.5% et 10.0% déformation équivalente*



a) b)

FIG. *A.132. Distributions de la somme de systèmes glissement a) et la densité de dislocations totale b) au 2.5 %, 5.0%, 7.5% et 10.0% déformation équivalente*

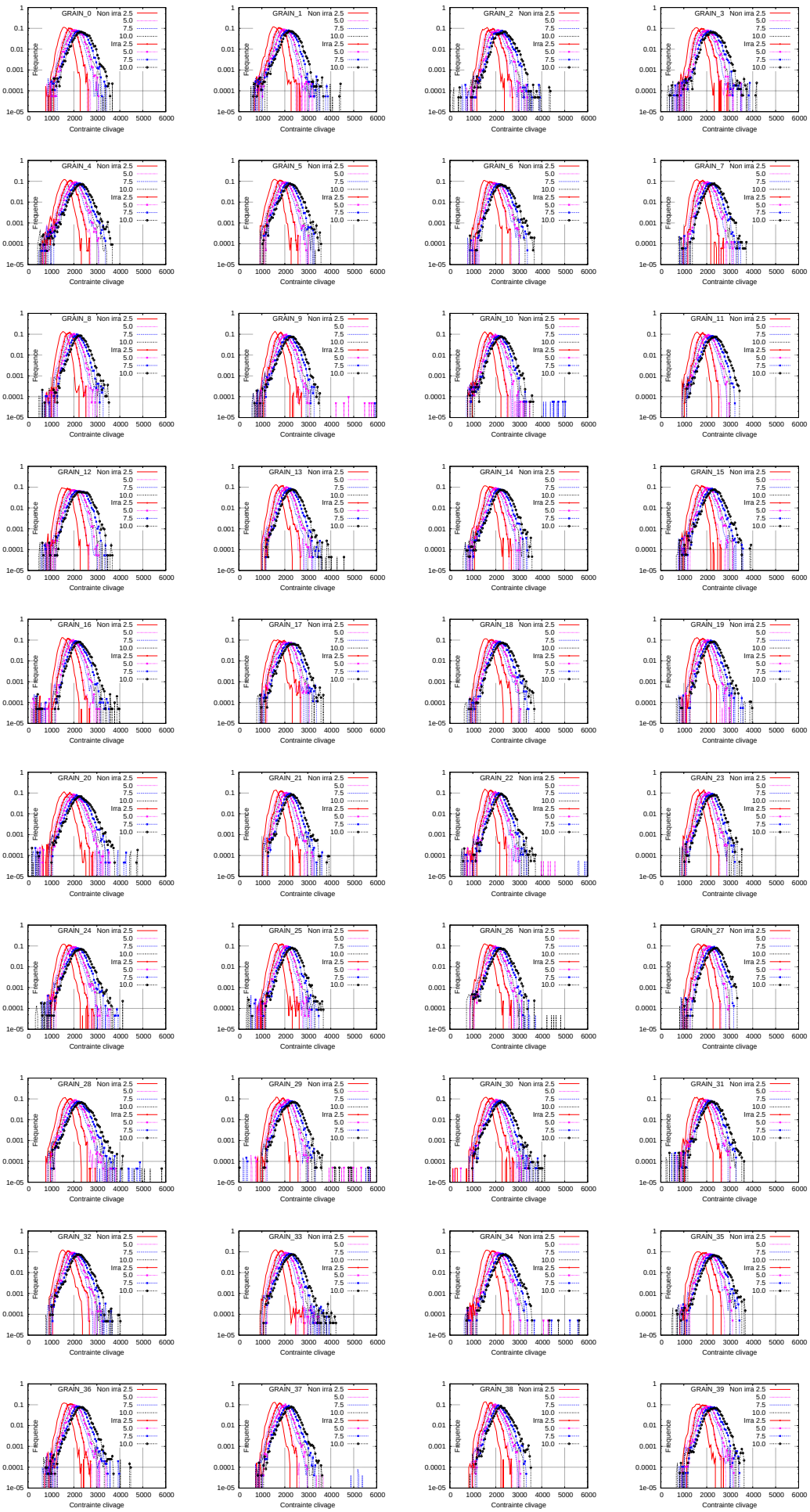


FIG. *A.133. Distribution de contrainte clivage dans les GRAINS (MPa)*

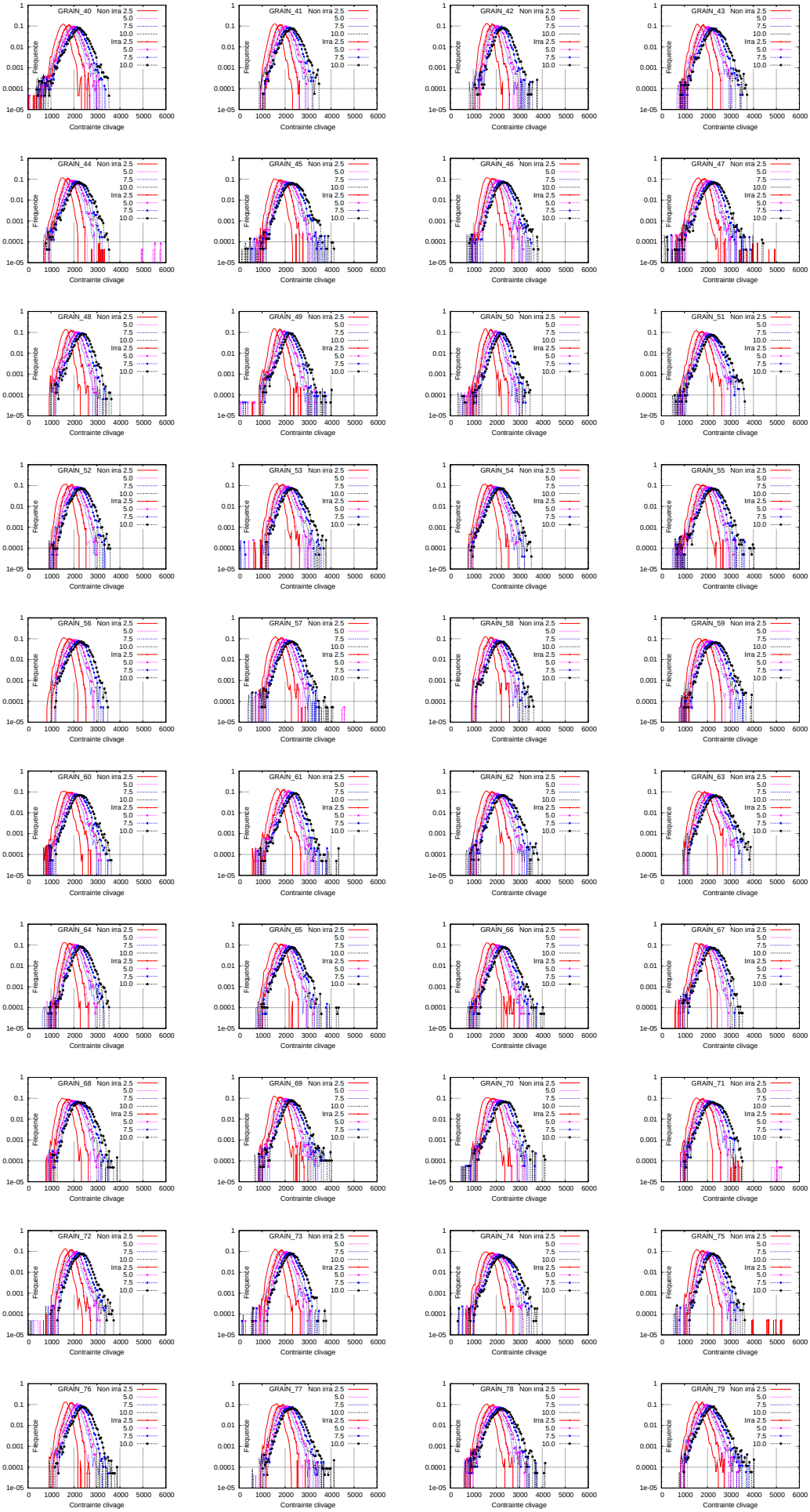


FIG. *A.134. Distribution de contrainte clivage dans les GRAINS (MPa)*

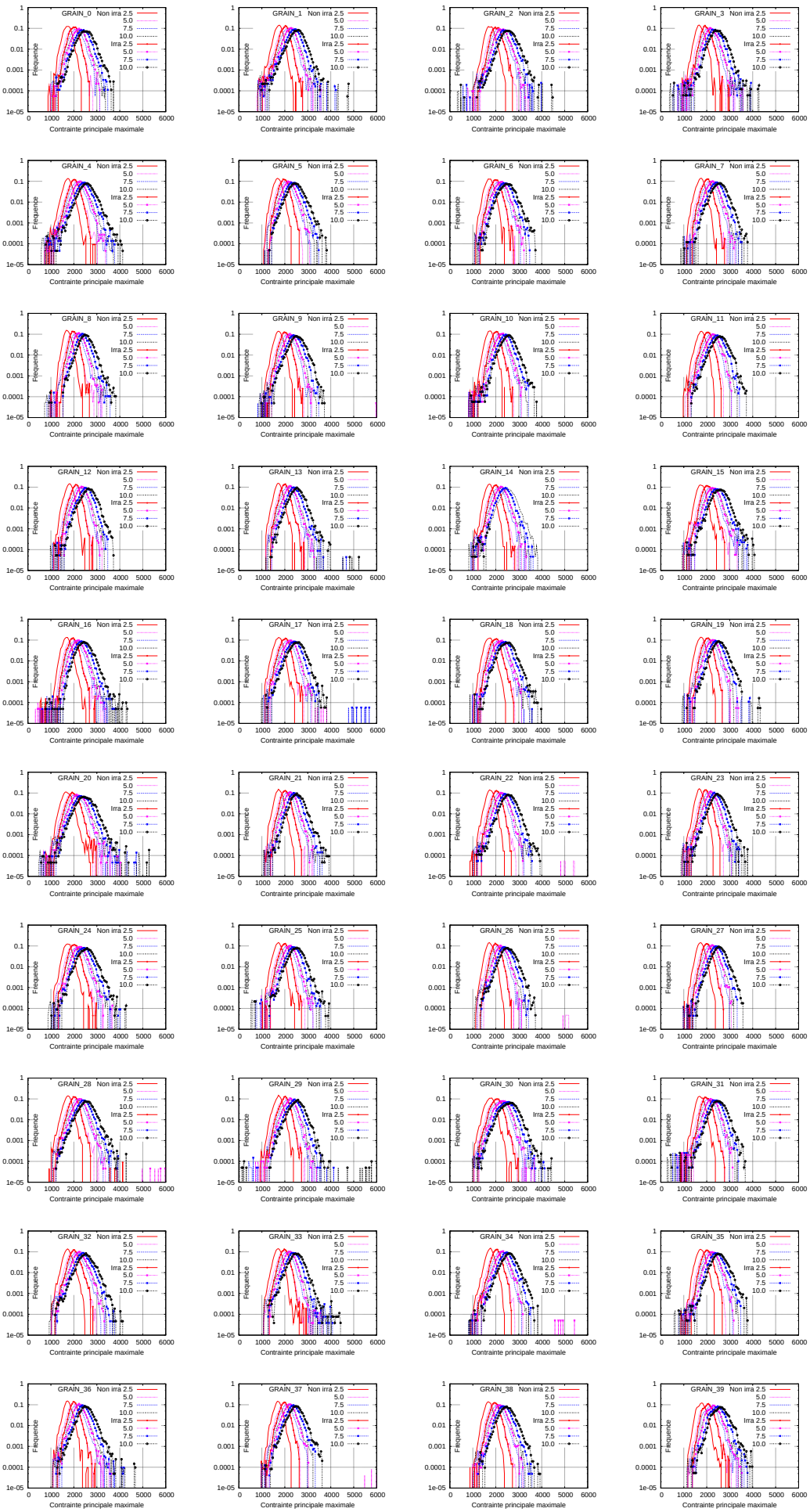


FIG. *A.135. Distribution de contrainte principale maximale dans les GRAINS (MPa)*

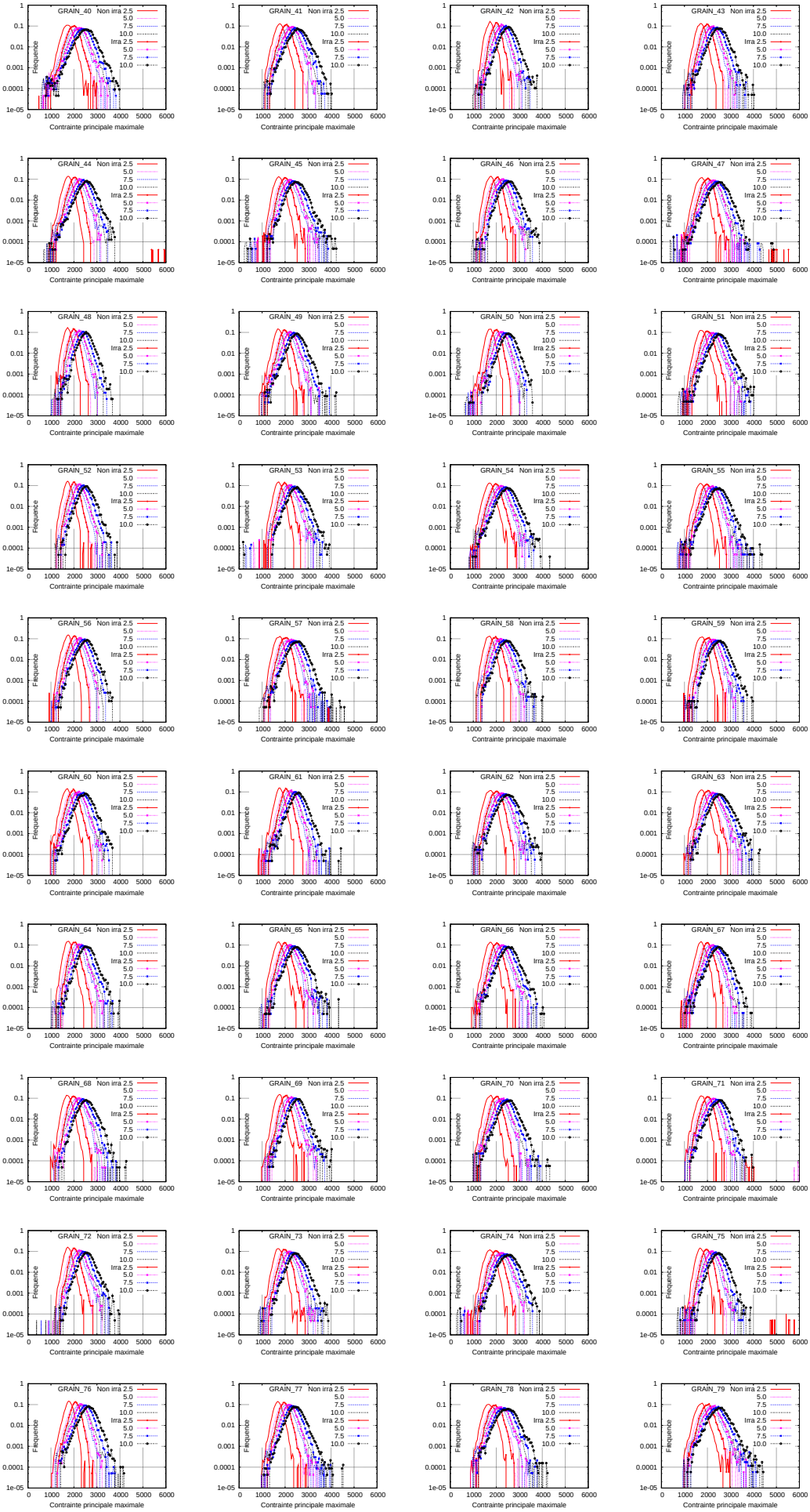


FIG. *A.136. Distribution de contrainte principale maximale dans les GRAINS (MPa)*

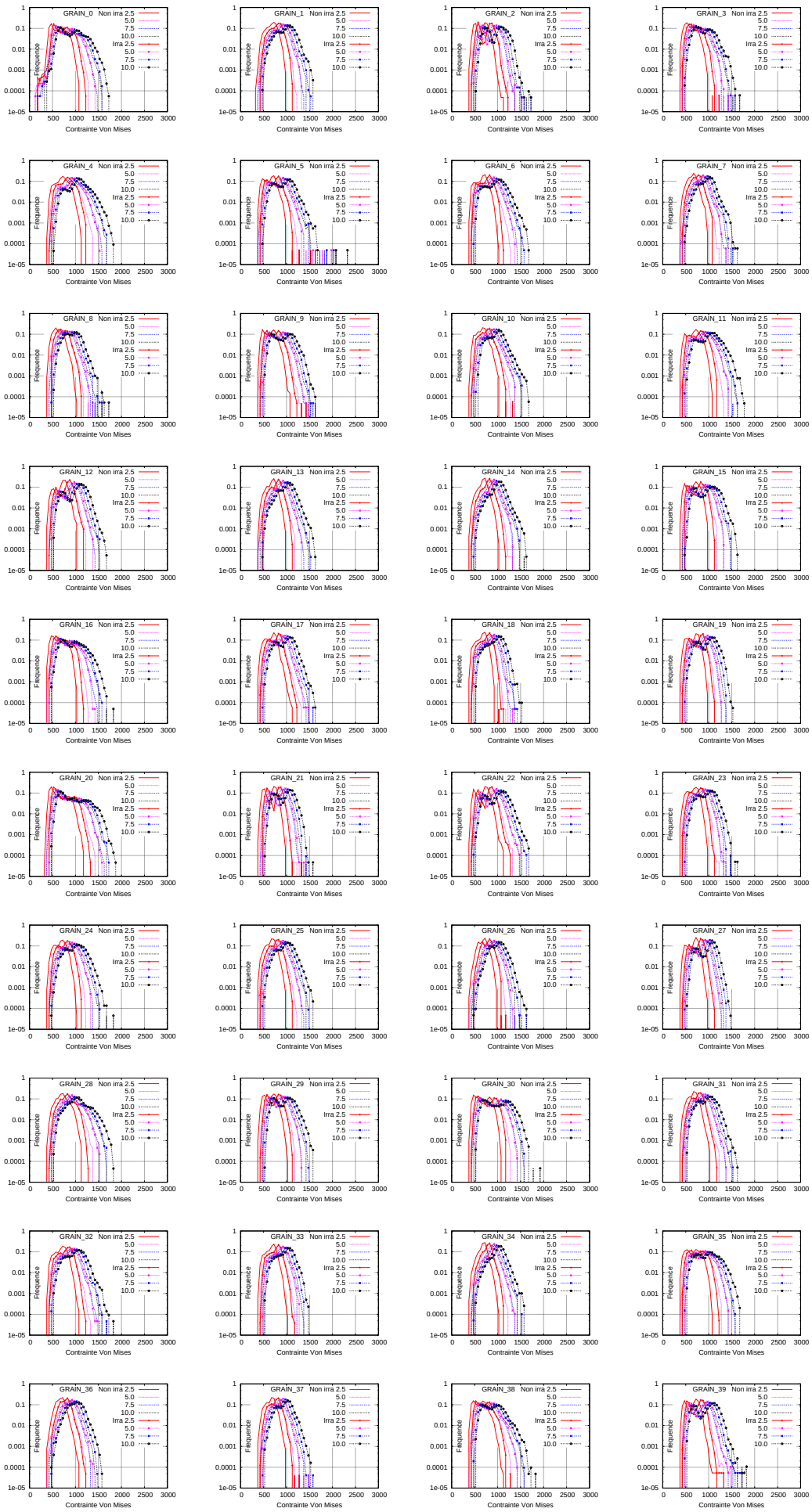


FIG. *A.137. Distribution de contrainte Von Mises dans les GRAINS (MPa)*

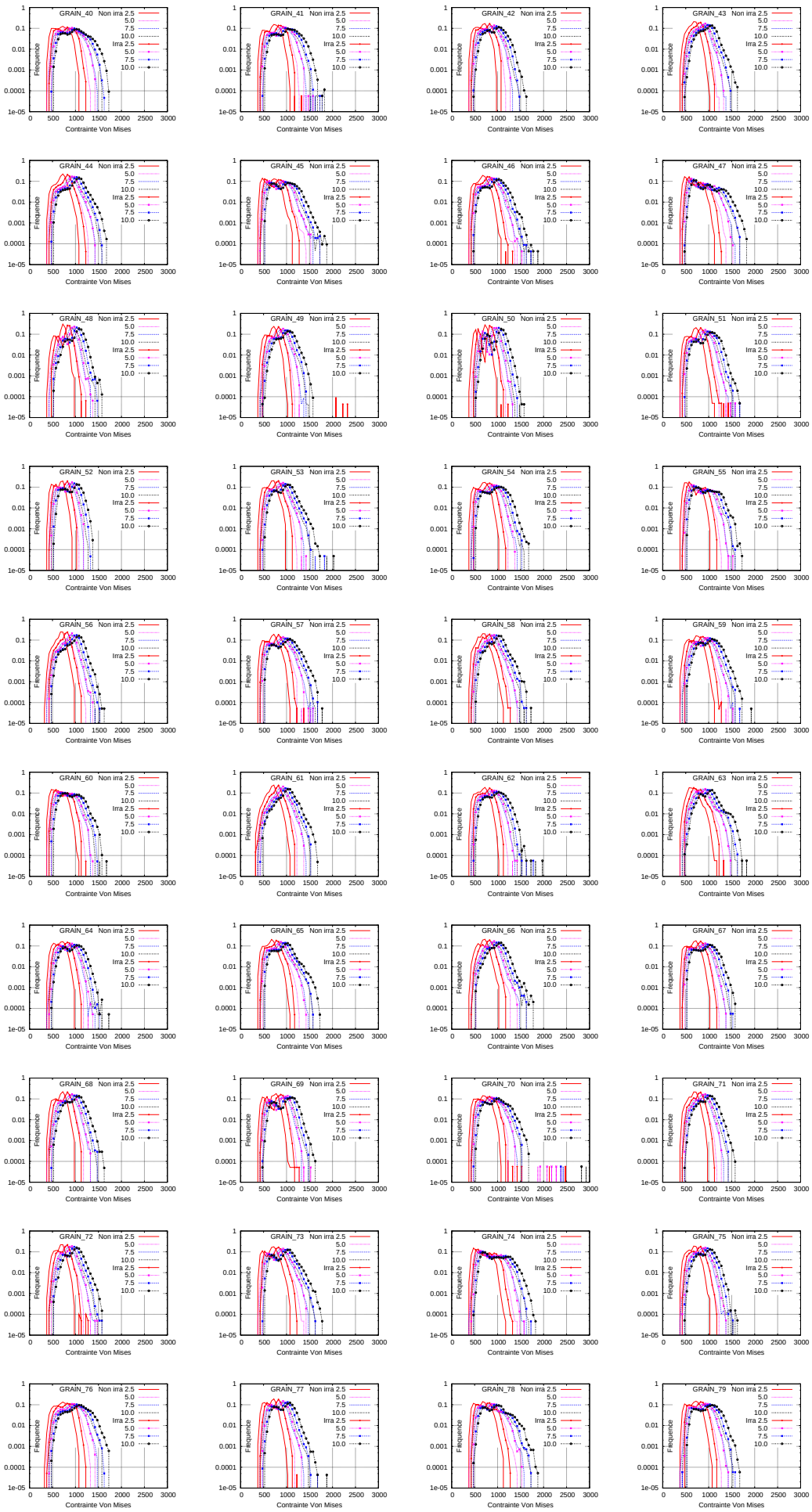


FIG. *A.138. Distribution de contrainte Von Mises dans les GRAINS (MPa)*

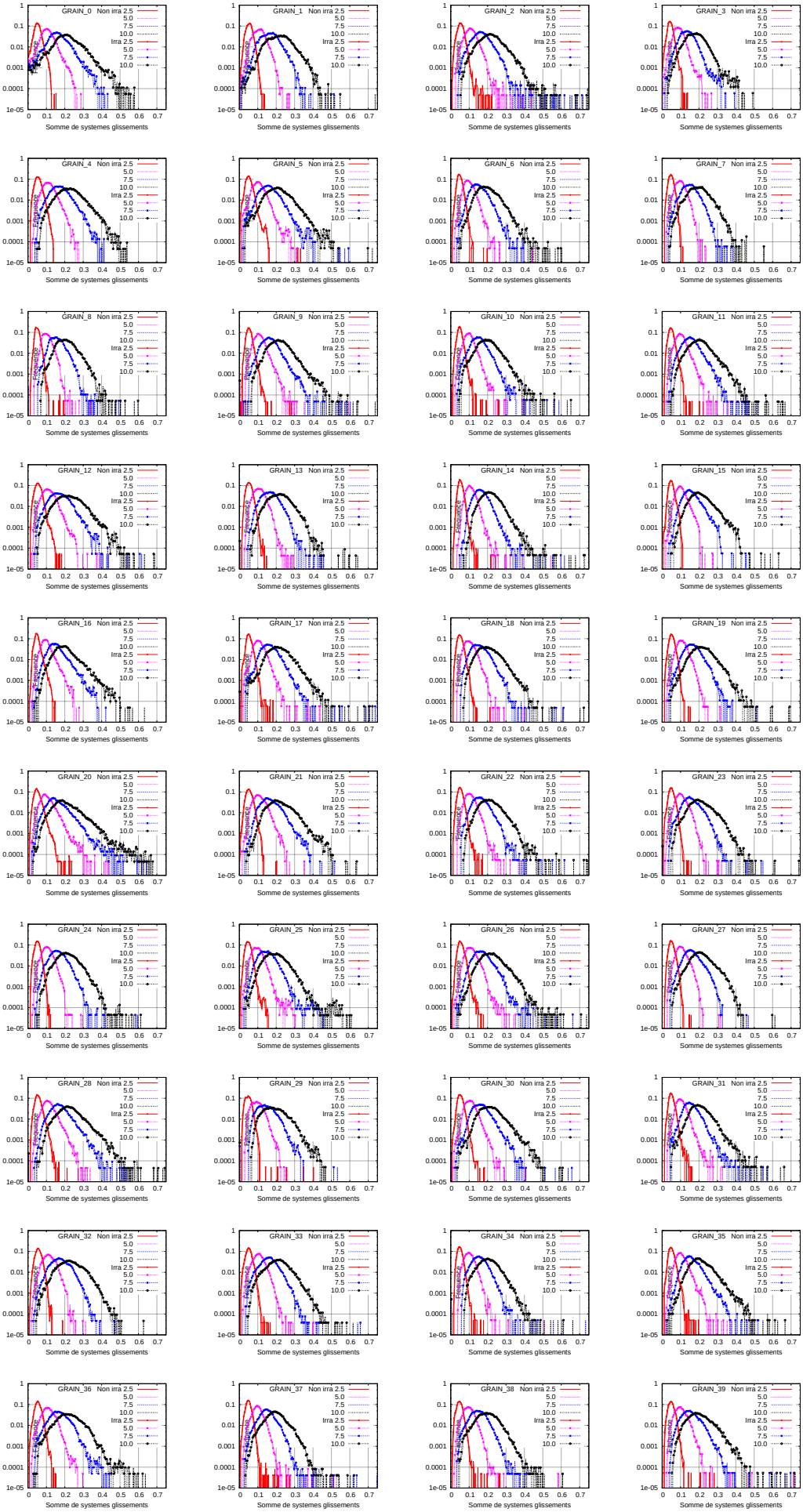


FIG. *A.139. Distribution de la somme de glissements des systèmes dans les GRAINS*

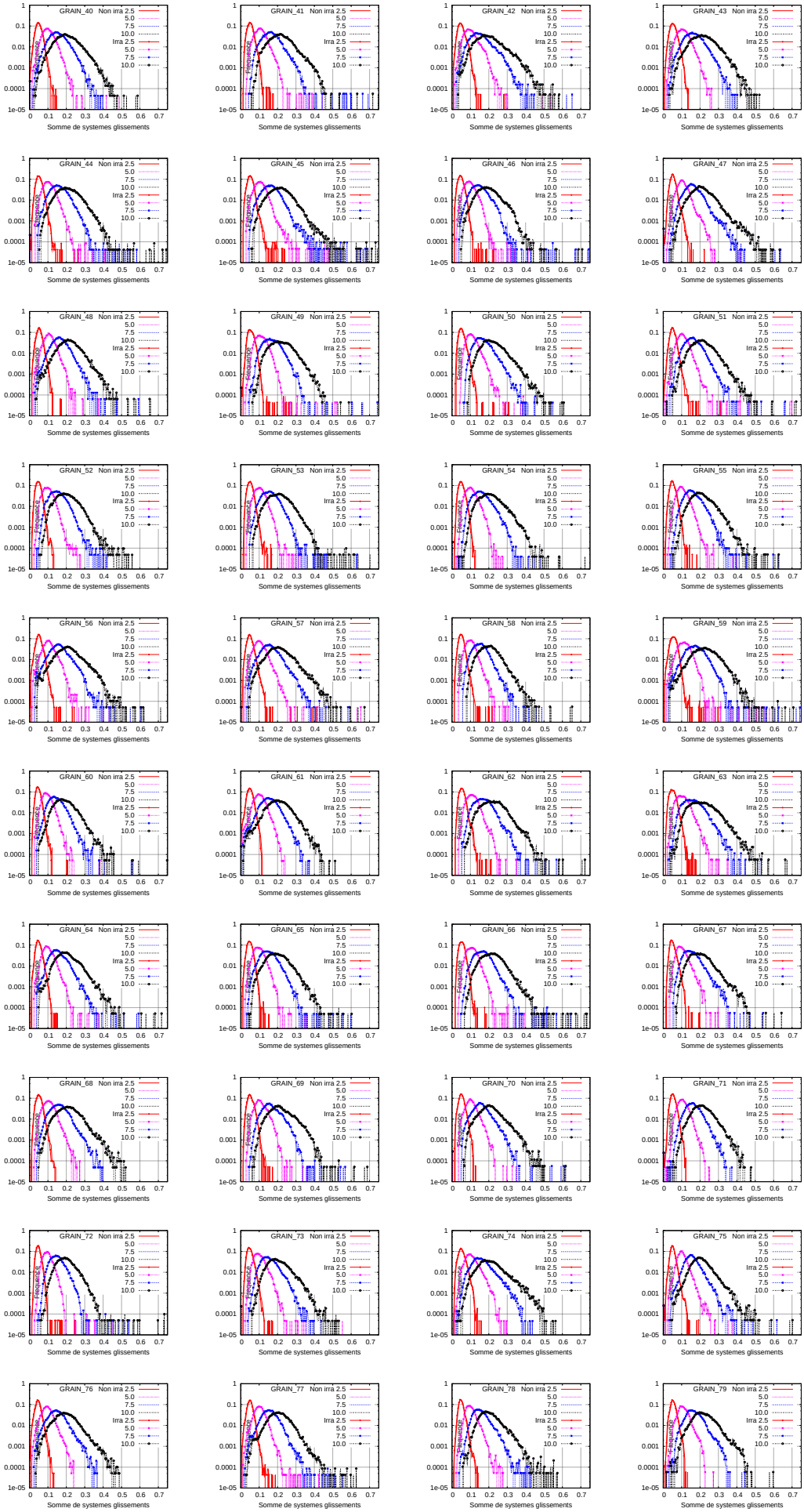


FIG. *A.140. Distribution de la somme de glissements des systèmes dans les GRAINS*

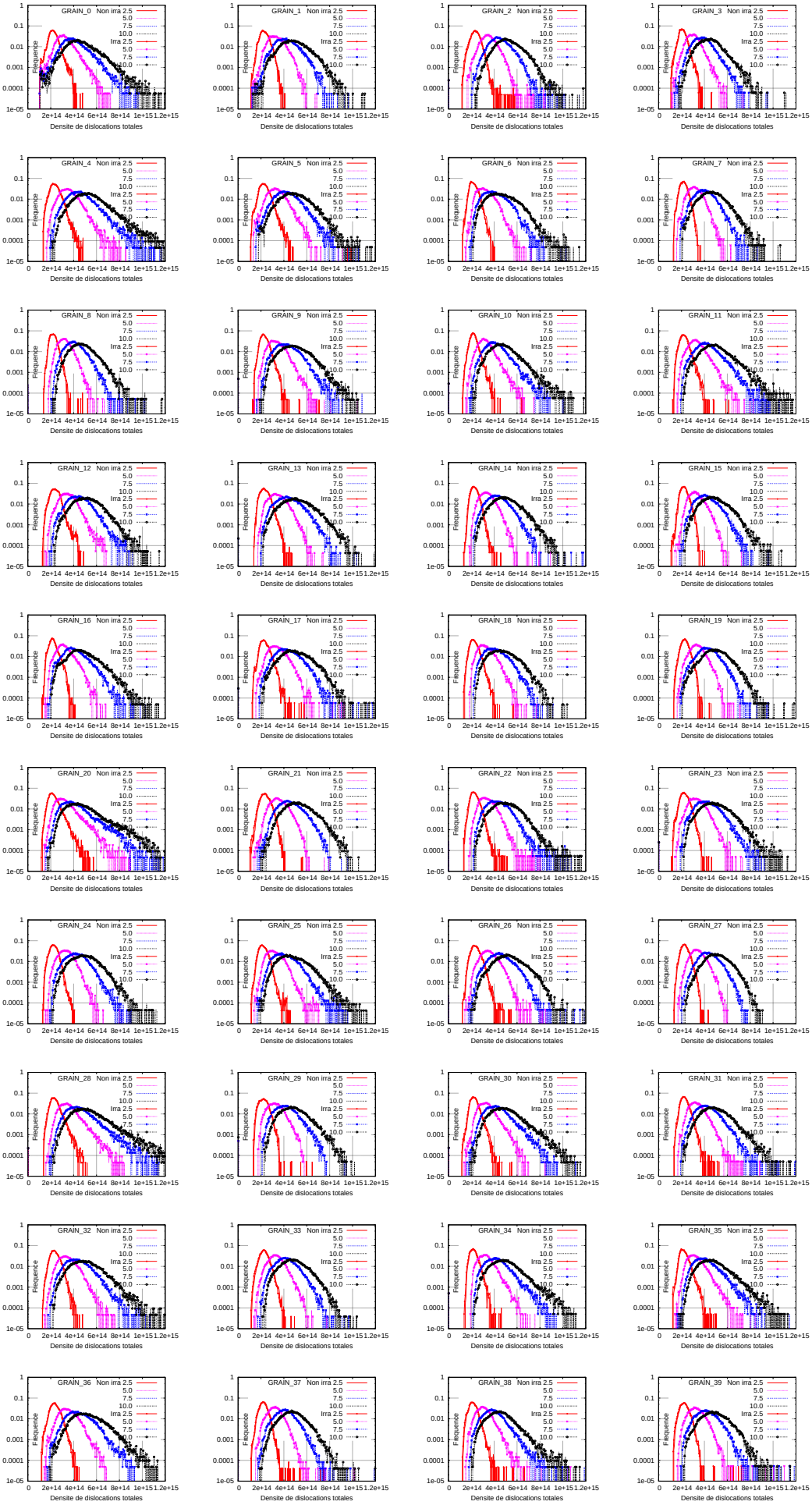


FIG. *A.141. Distribution de la densité de dislocations totales dans les GRAINS*

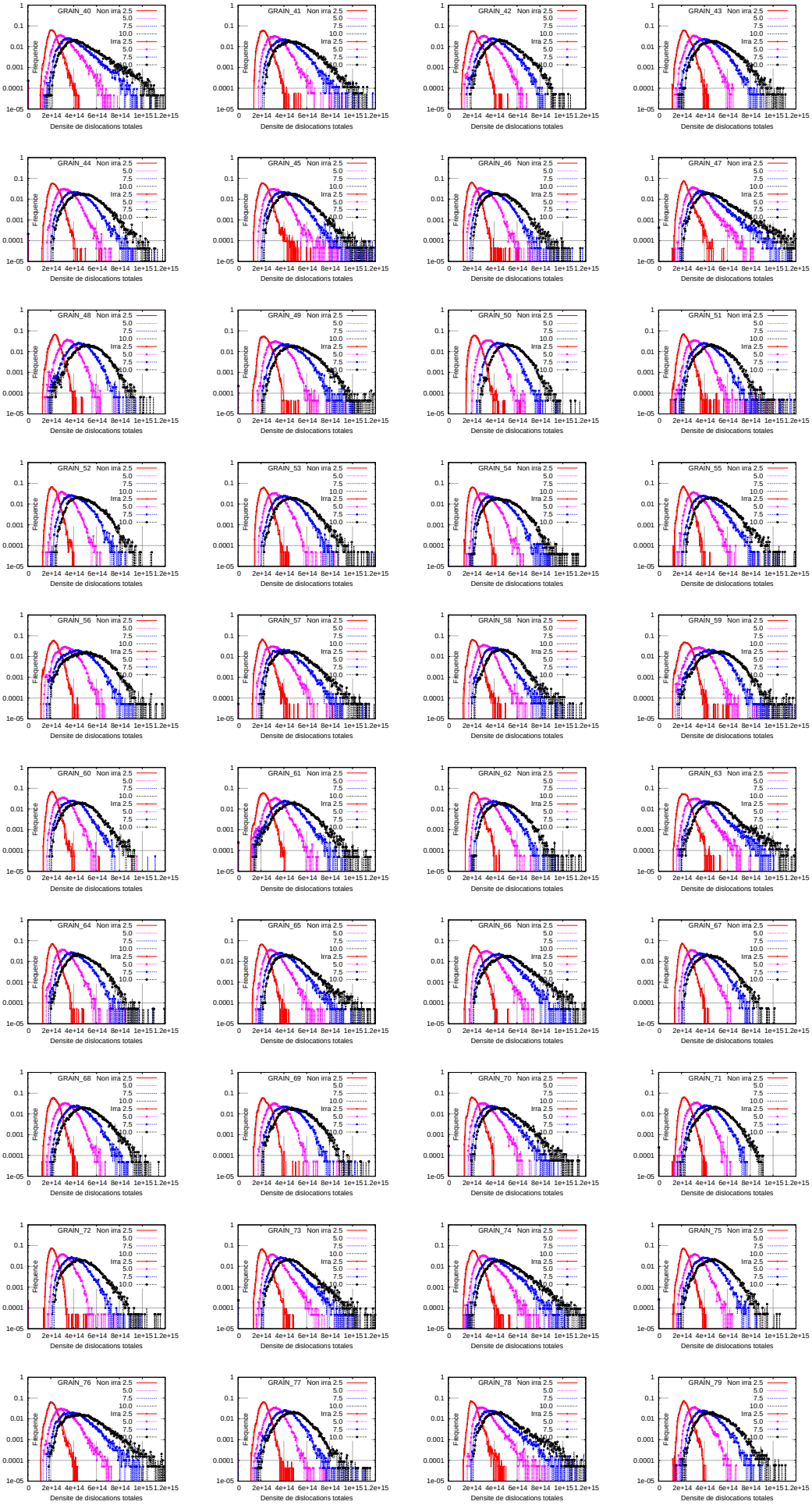


FIG. *A.142. Distribution de la densité de dislocations totales dans les GRAINS*

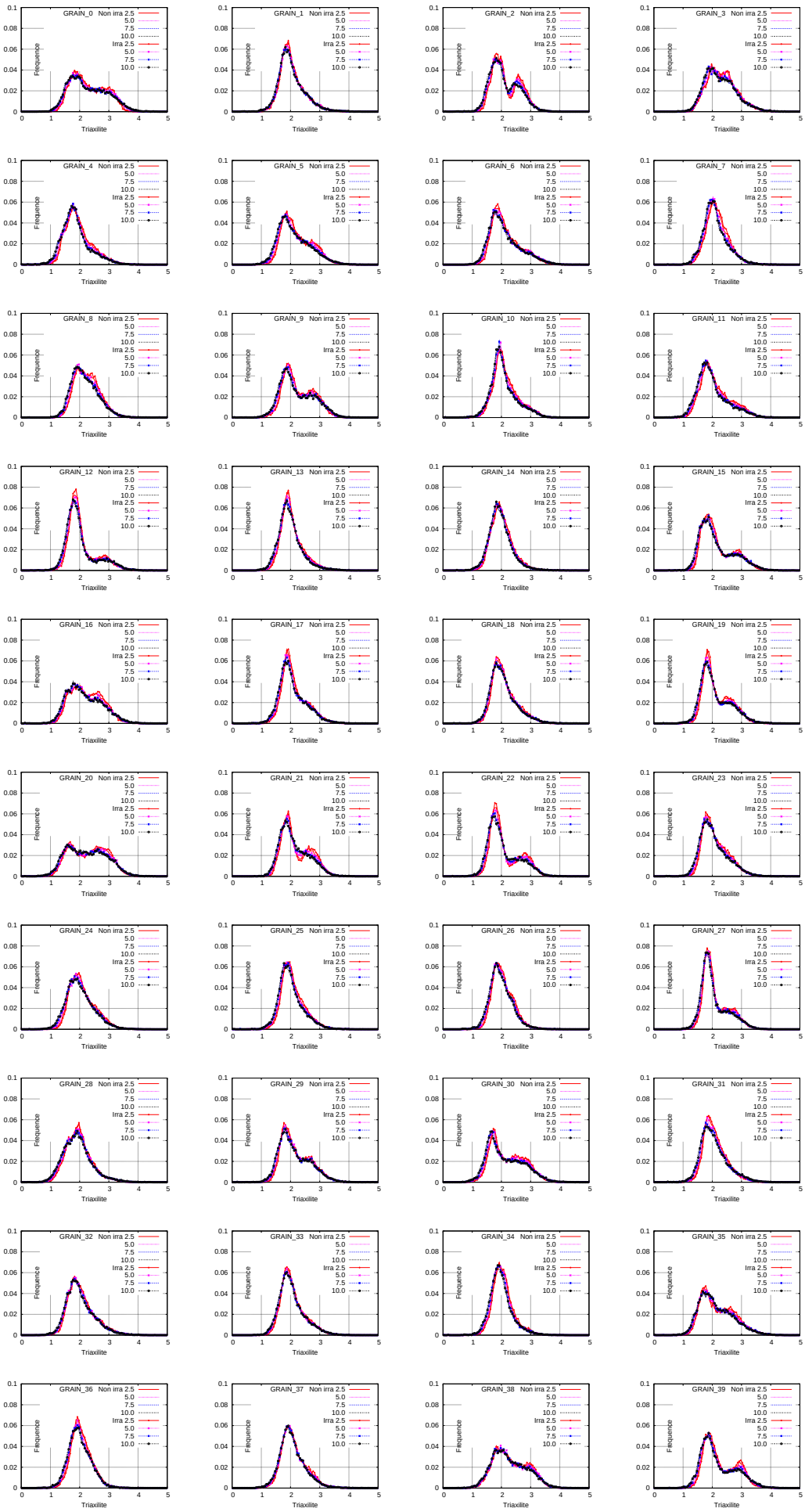


FIG. *A.143. Distribution de la triaxilité dans les GRAINS*

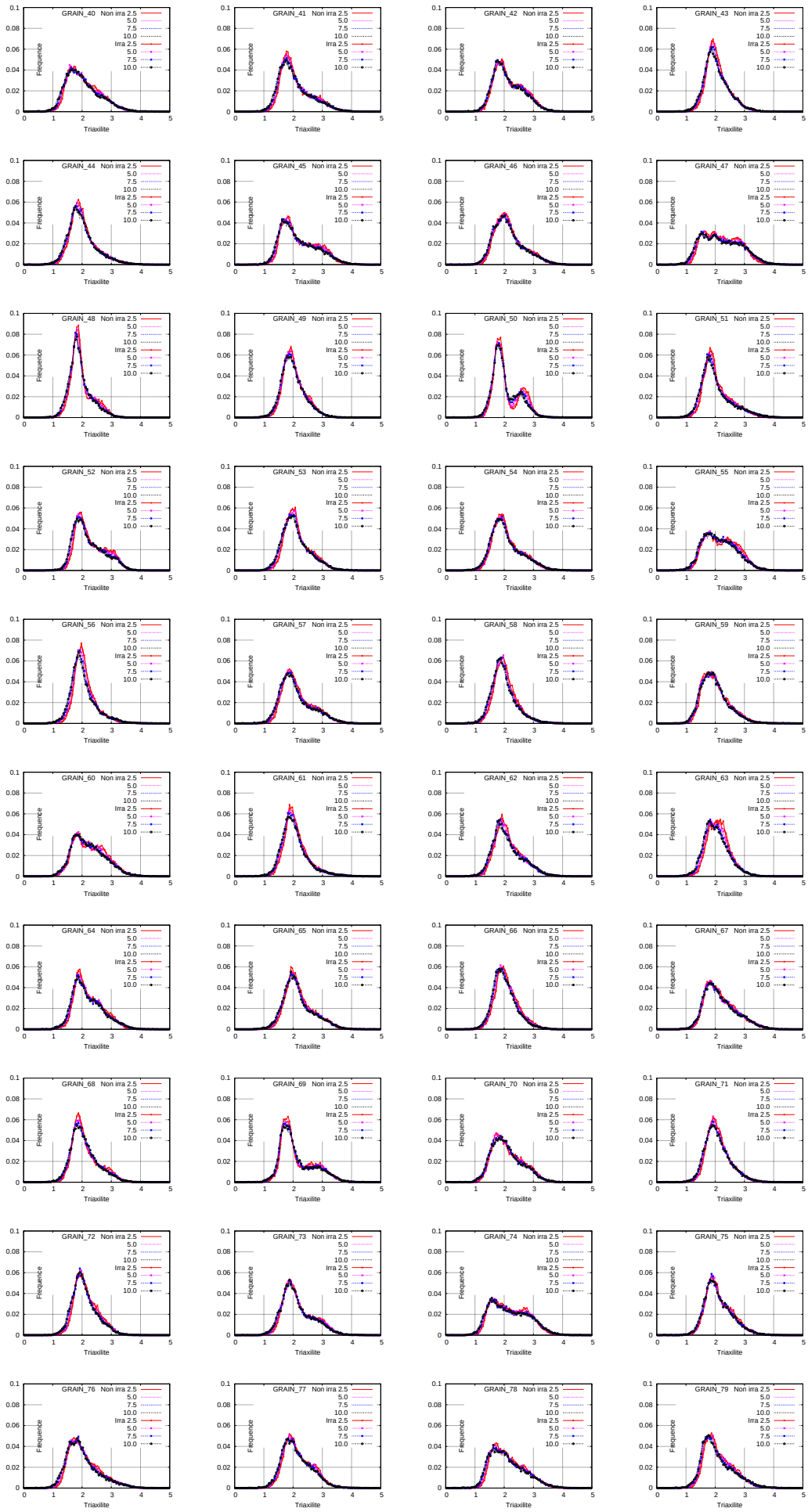


FIG. *A.144. Distribution de la triaxilité dans les GRAINS*

A.3.3 Matériaux irradié et non irradié à température −90°C à la contrainte principale moyenne 2200 (MPa)

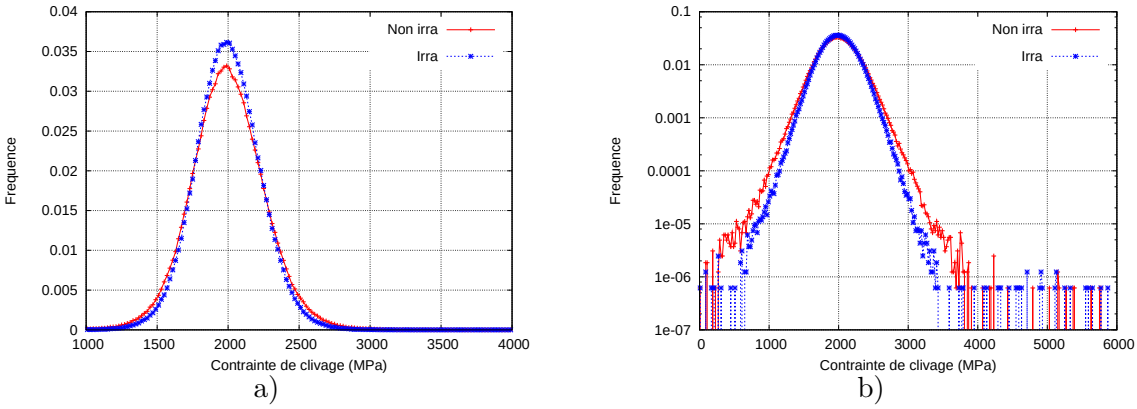


FIG. *A.145. Distribution de contrainte de clivage à la contrainte principale moyenne 2200 (MPa)*

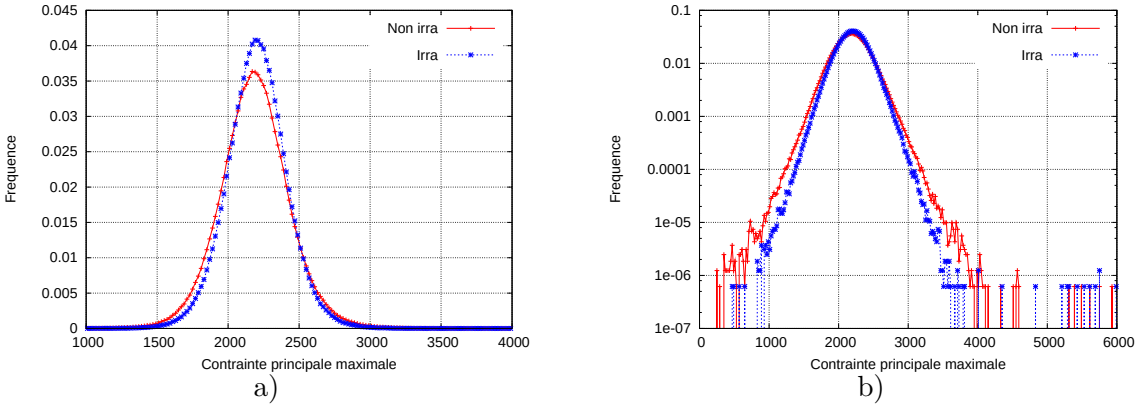


FIG. *A.146. Distribution de contrainte principale maximale à la contrainte principale moyenne 2200 (MPa)*

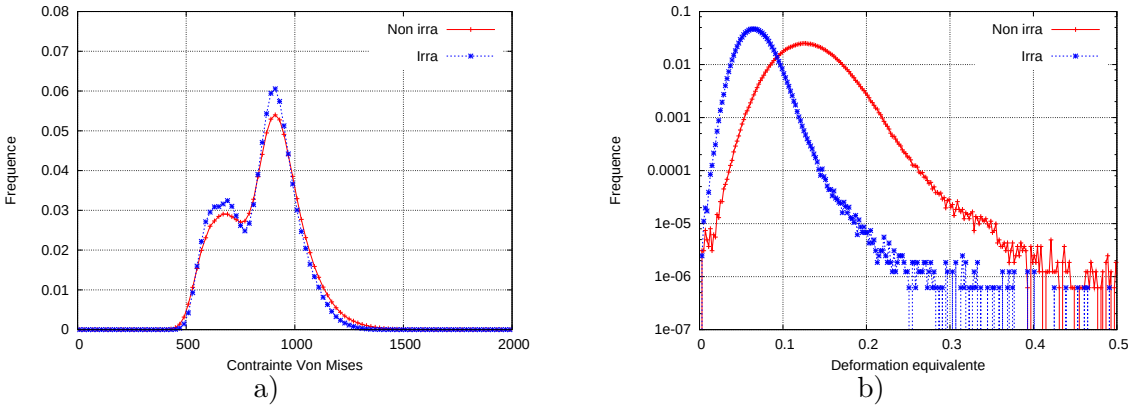
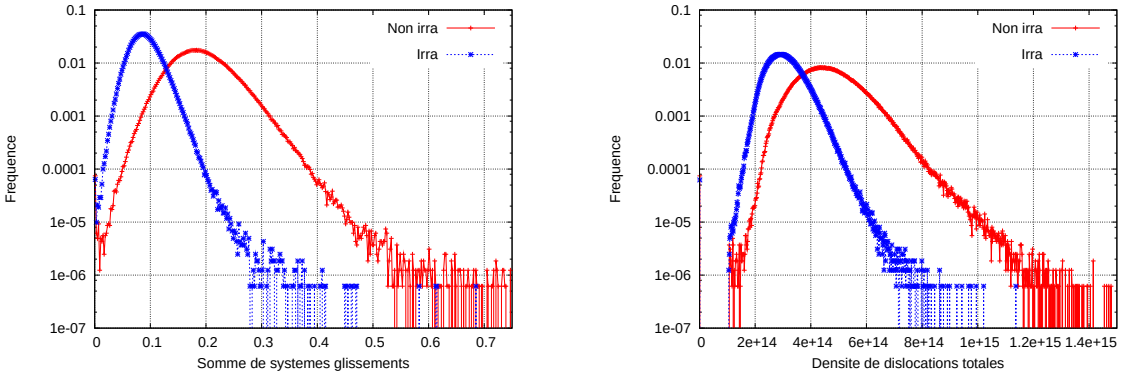


FIG. *A.147. Distribution de contrainte Von Mises a) et déformation équivalente b) à la contrainte principale moyenne 2200 (MPa)*



a) b)

FIG. *A.148. Distributions de la somme de systèmes glissement a) et la densité de dislocations totale b) à la contrainte principale moyenne 2200 (MPa)*

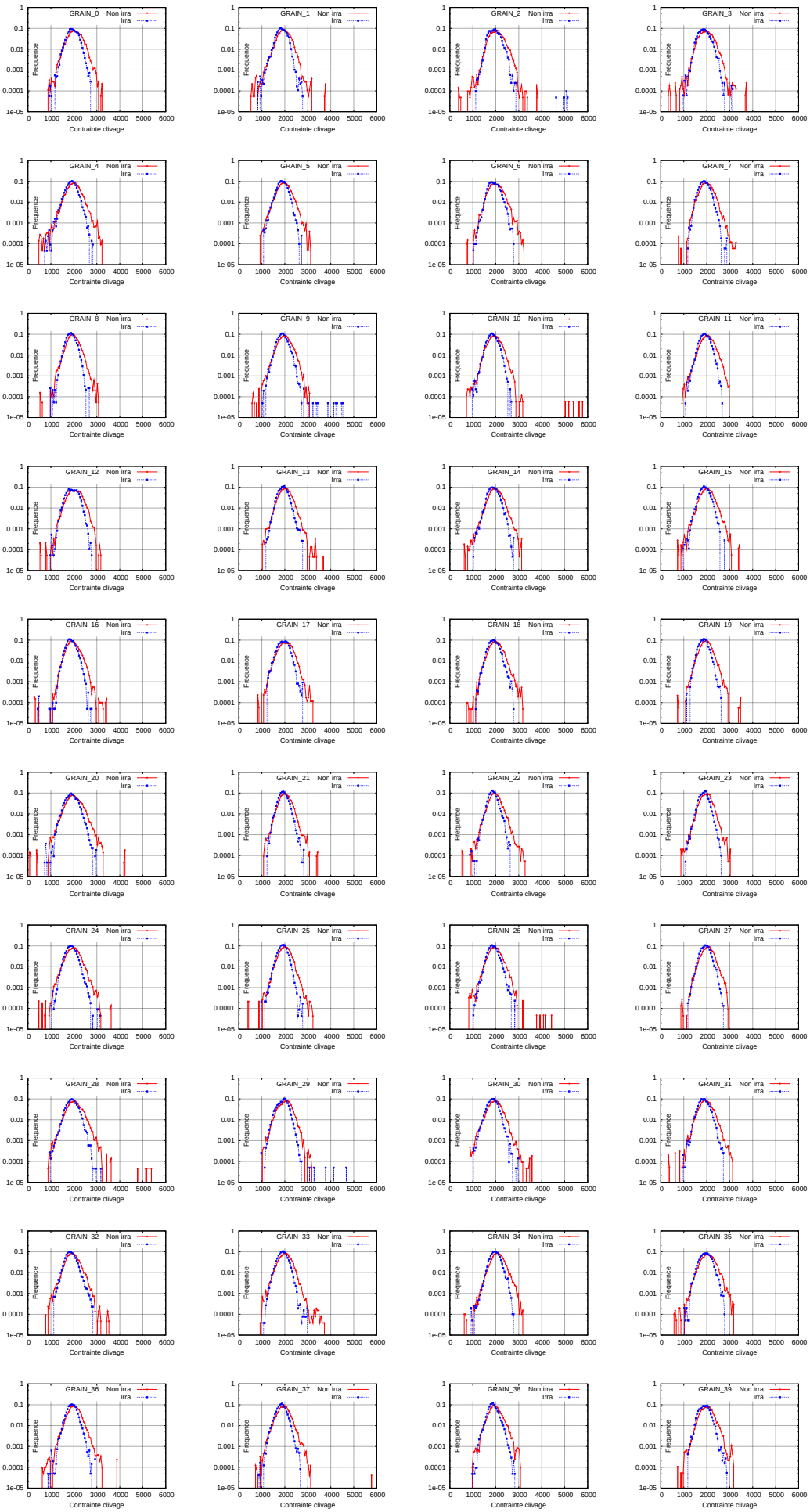


FIG. *A.149. Distribution de contrainte clivage dans les GRAINS (MPa)*

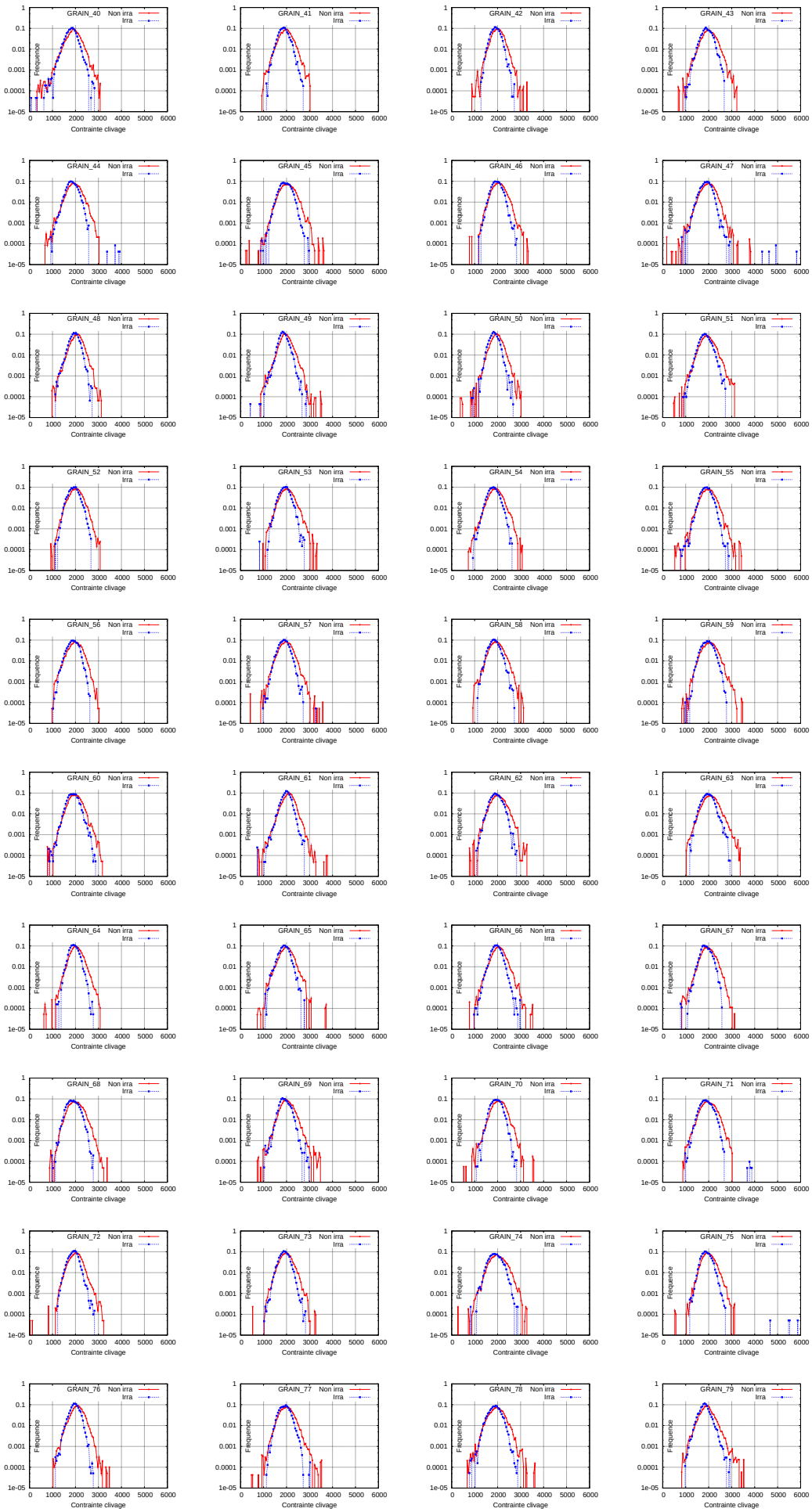


FIG. *A.150. Distribution de contrainte clivage dans les GRAINS (MPa)*

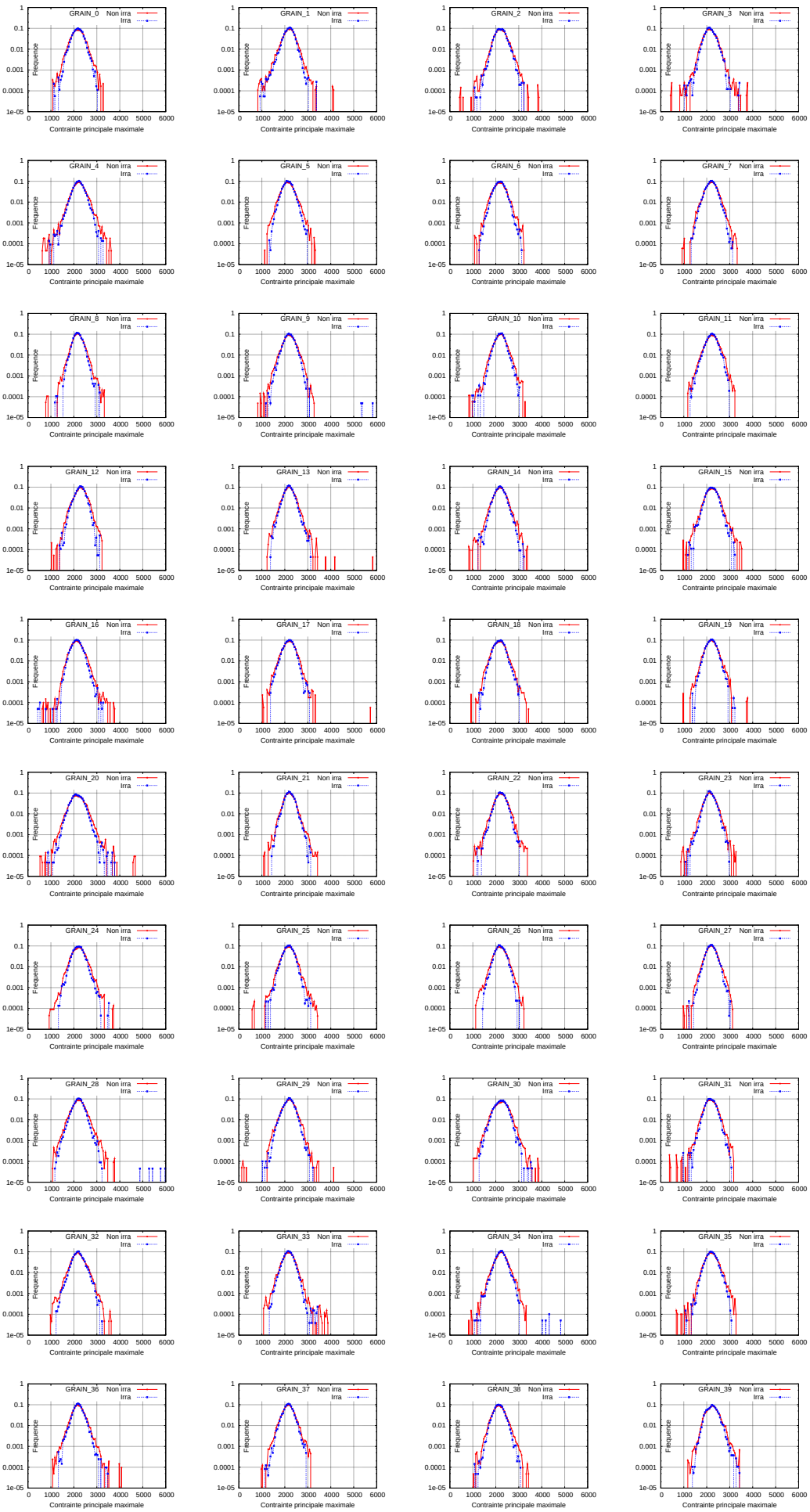


FIG. *A.151. Distribution de contrainte principale maximale dans les GRAINS (MPa)*

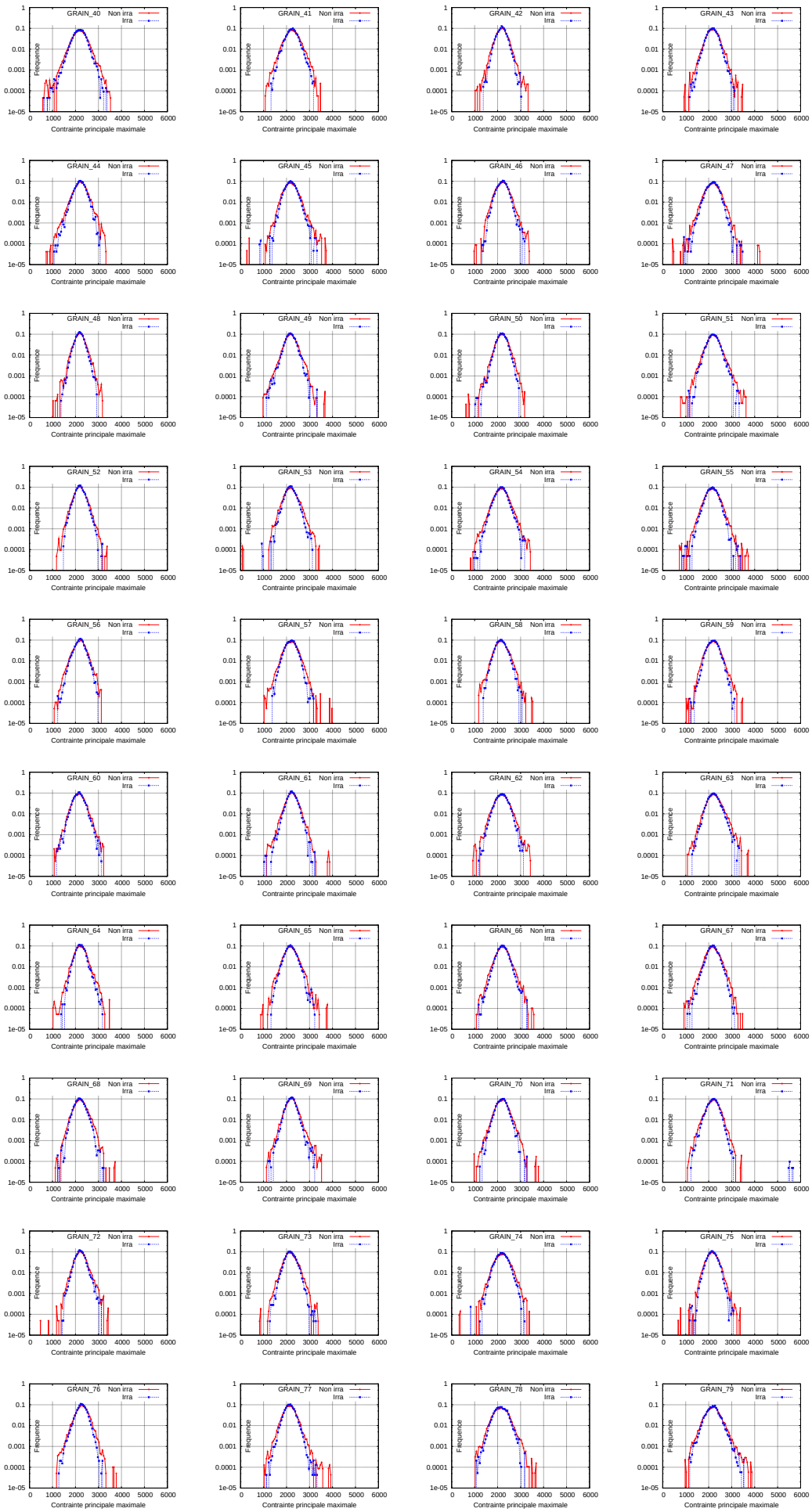


FIG. *A.152. Distribution de contrainte principale maximale dans les GRAINS (MPa)*

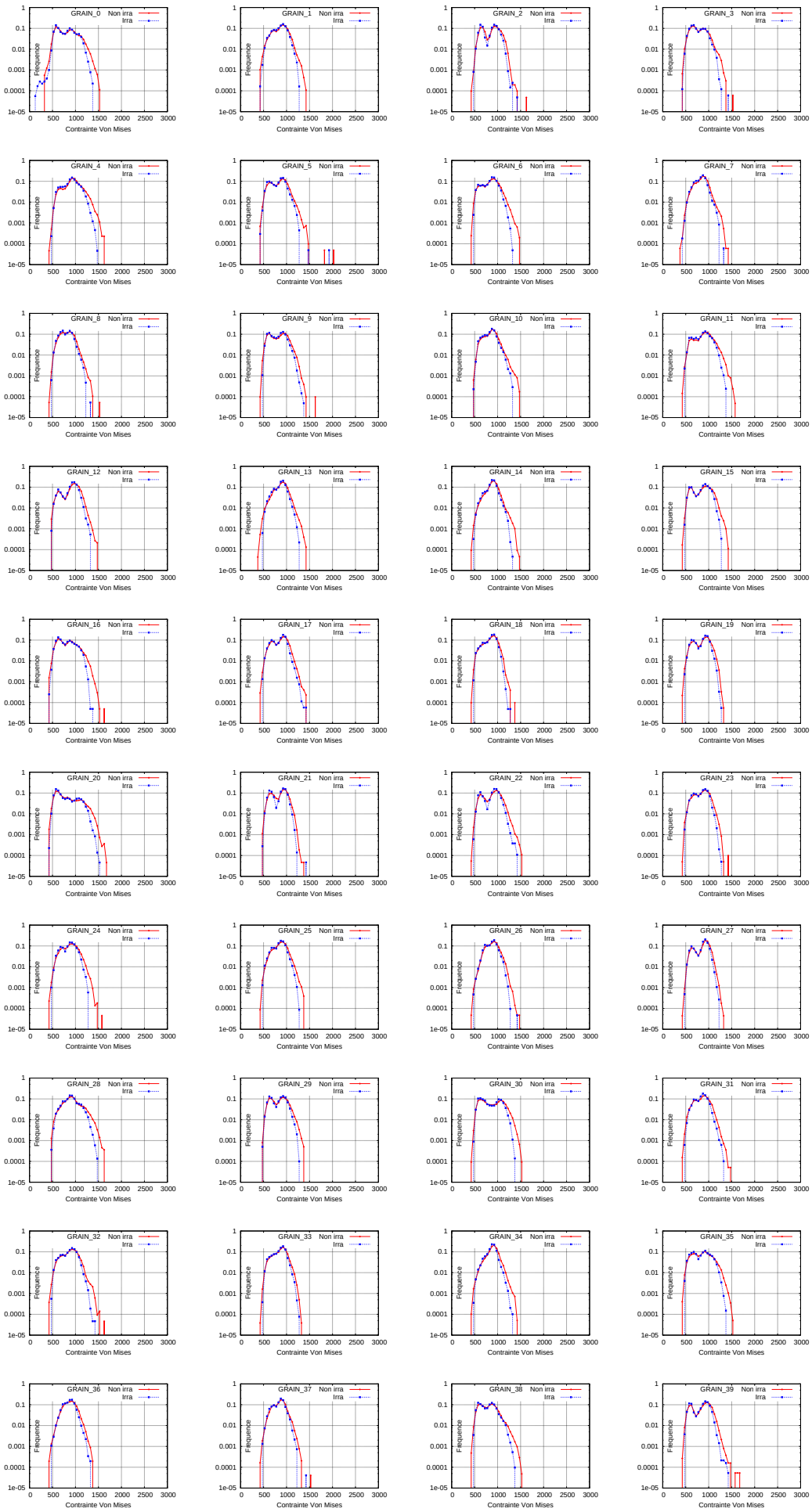


FIG. *A.153. Distribution de contrainte Von Mises dans les GRAINS (MPa)*

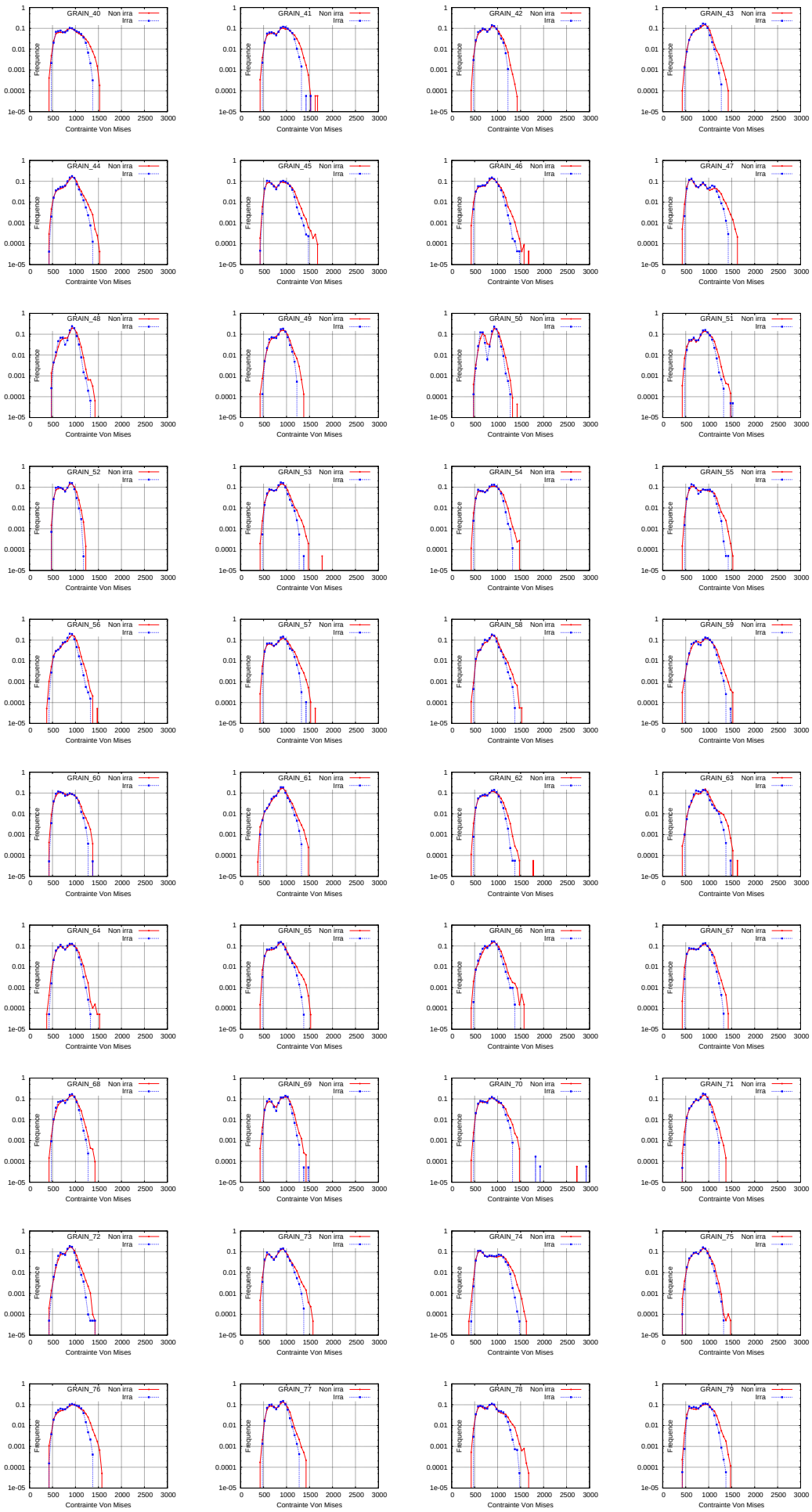


FIG. *A.154. Distribution de contrainte Von Mises dans les GRAINS (MPa)*

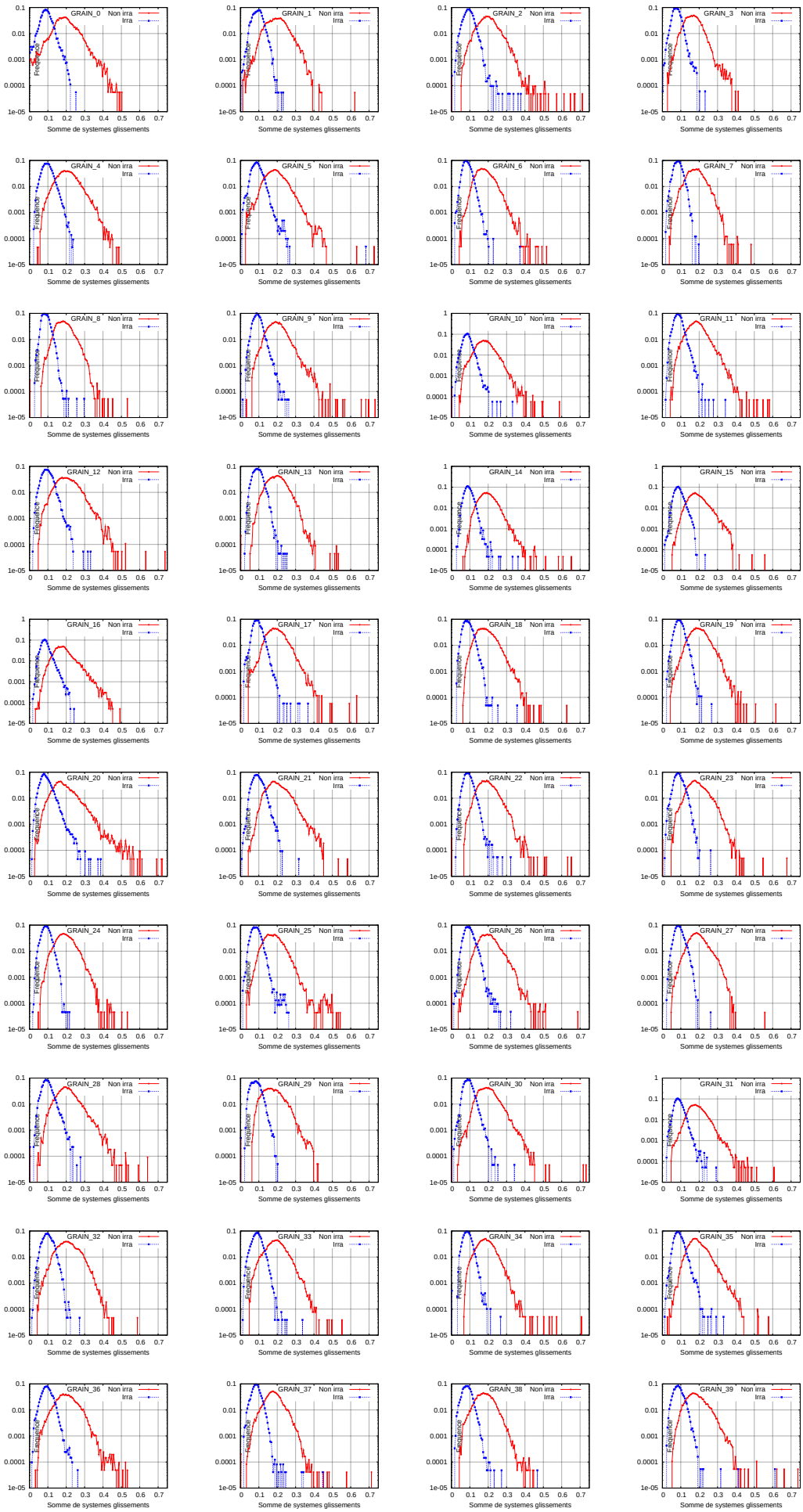


FIG. *A.155. Distribution de la somme de glissements des systèmes dans les GRAINS*

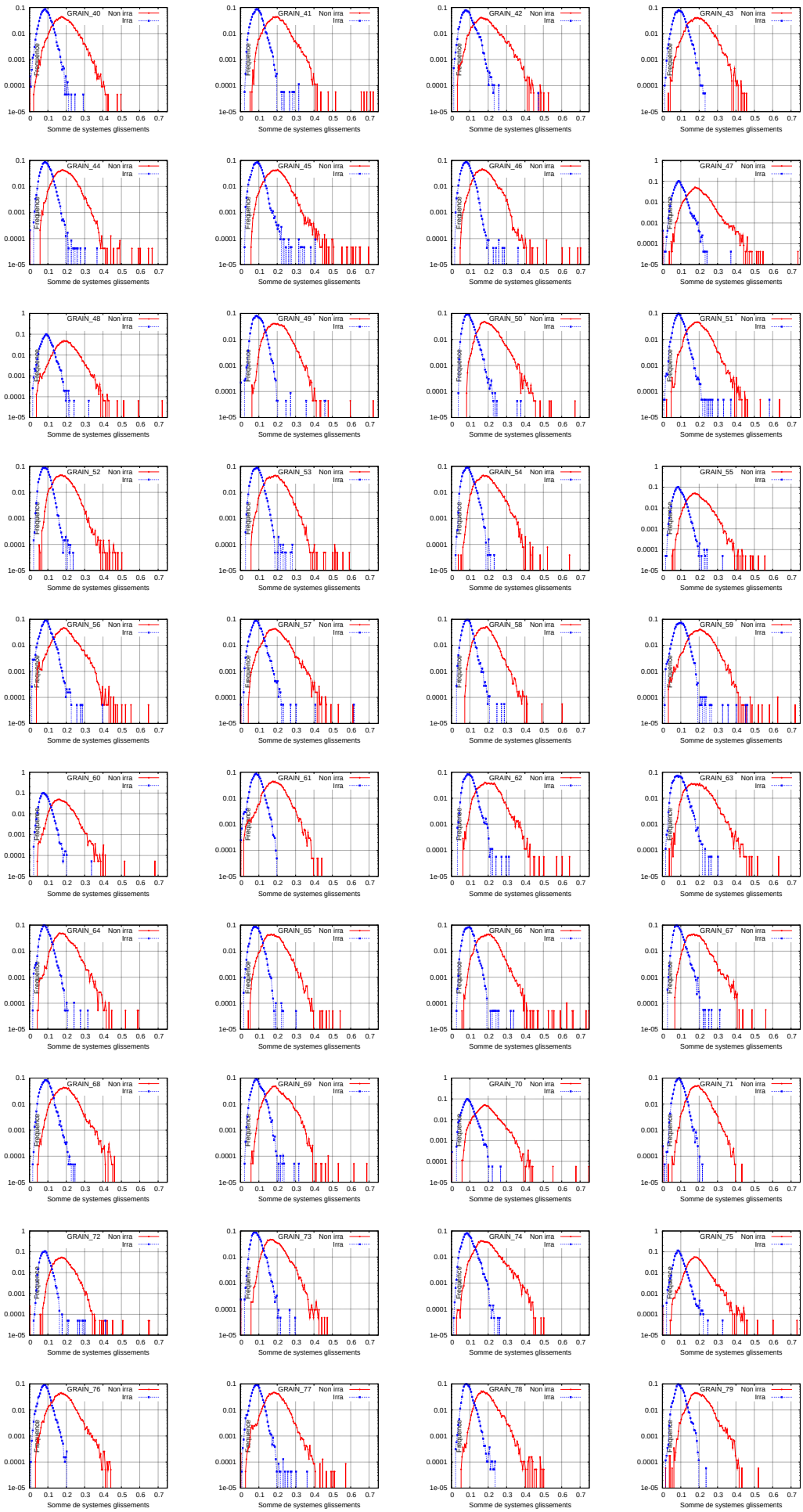


FIG. *A.156. Distribution de la somme de glissements des systèmes dans les GRAINS*

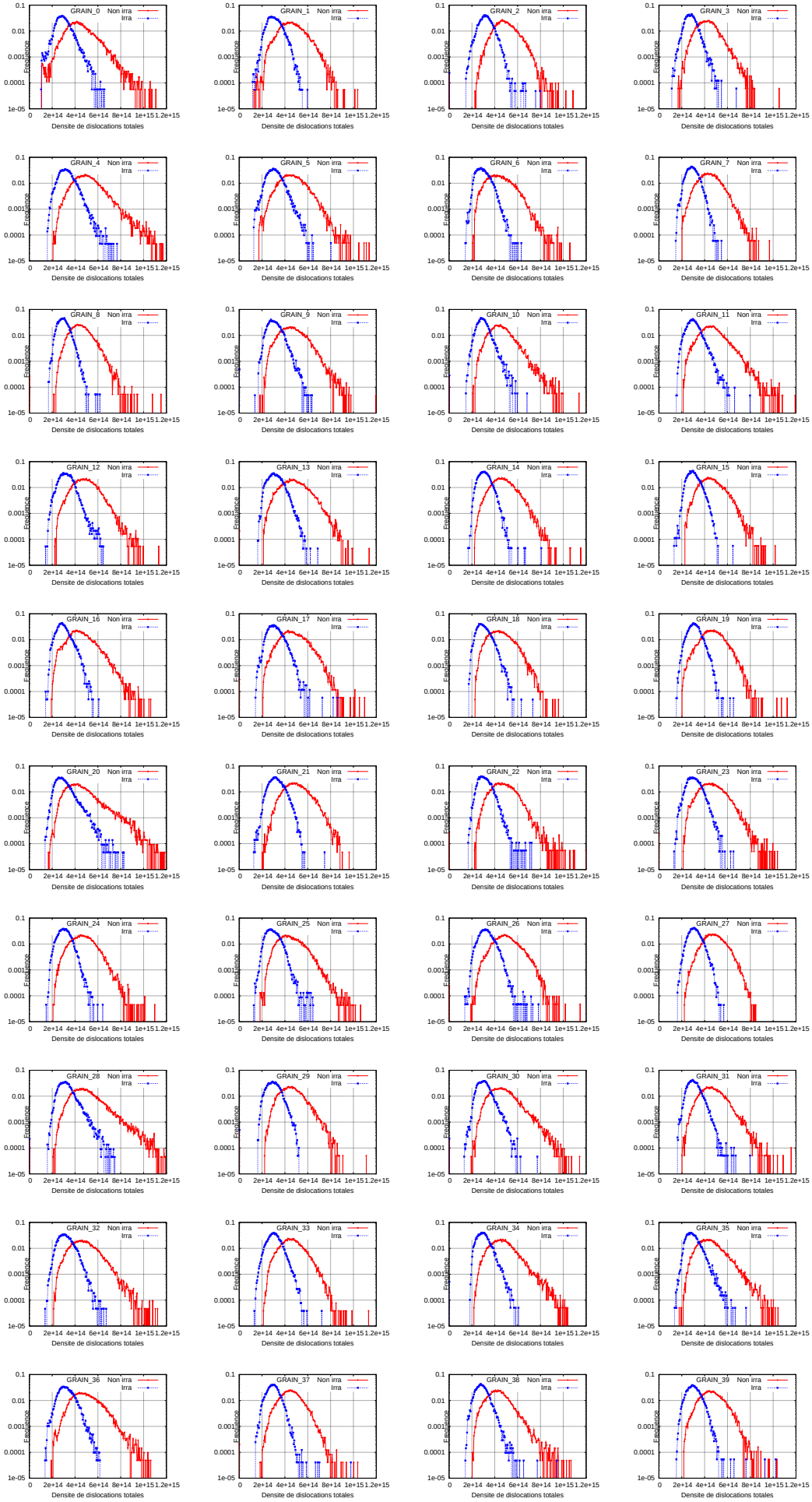


FIG. *A.157. Distribution de la densité de dislocations totales dans les GRAINS*

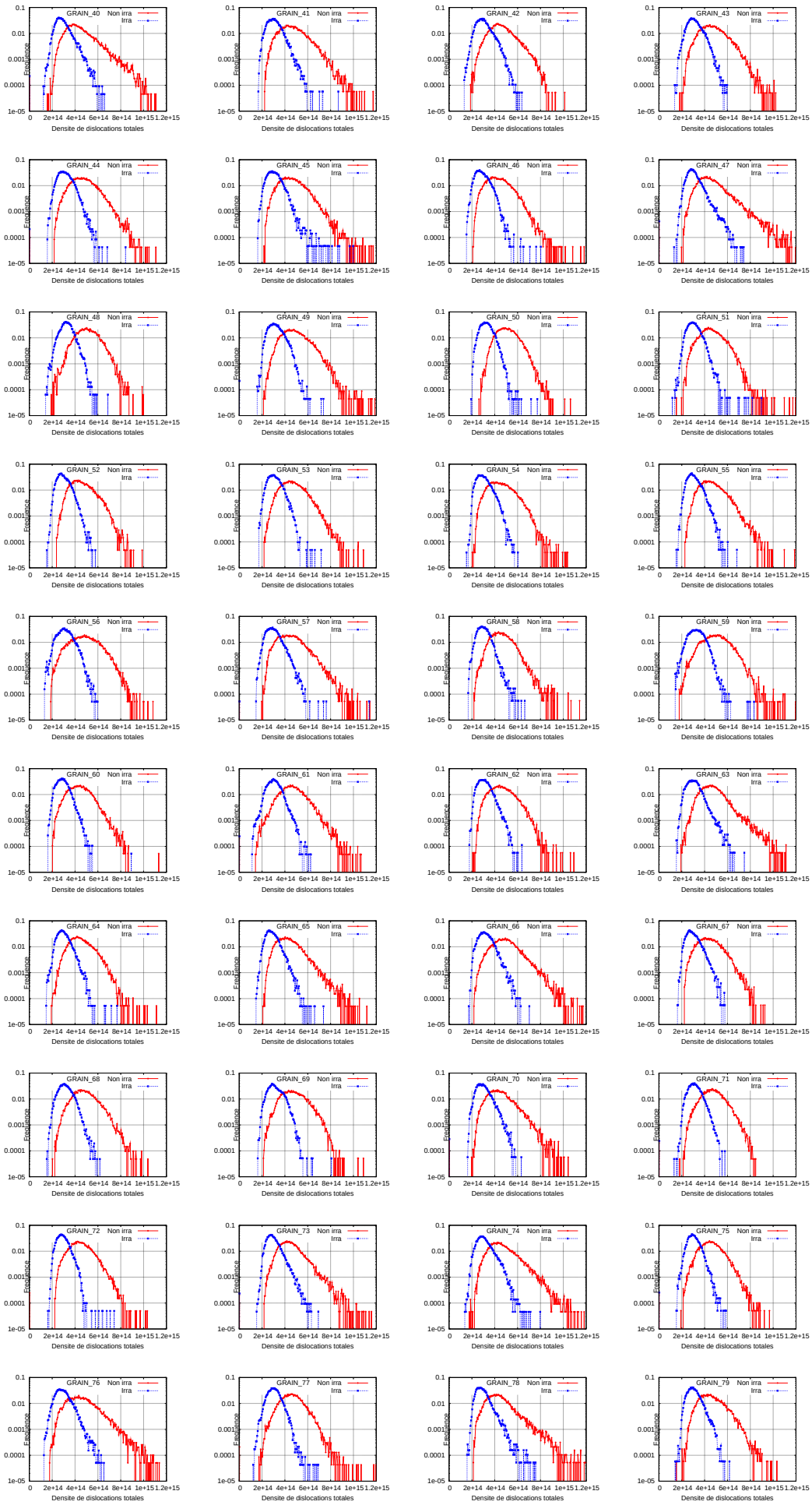


FIG. *A.158. Distribution de la densité de dislocations totales dans les GRAINS*

Modélisation du comportement en plasticité et à rupture des aciers bainitiques irradiés

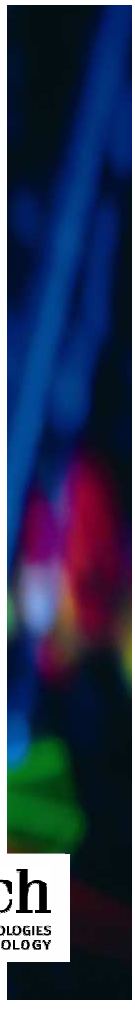
RESUME : Les aciers faiblement alliés sont utilisés dans les réacteurs nucléaires pour la réalisation de différents équipements. Soumis à une irradiation neutronique induite par le fonctionnement du réacteur, ces matériaux présentent des évolutions notables de leur microstructure, avec en particulier l'apparition de défauts d'irradiation comme des boucles interstitielles, des amas lacunaires et des précipités, qui conduisent à un durcissement et une fragilisation en relation directe avec la dose reçue et le flux neutronique. Le comportement en plasticité hors irradiation des aciers bainitiques faiblement alliés a fait l'objet de plusieurs modélisations élaborées à partir d'observations expérimentales et de modélisations à l'échelle atomique. Plusieurs thèses ont été supportées par EDF et le CEA dans le passé. Ce travail se place dans leur prolongement, et adopte une démarche classique, en utilisant des éléments expérimentaux connus, mais il se place de façon déterminée à l'échelle de la microstructure, et cherche à intégrer un maximum d'informations de métallurgie physique. C'est dans cet esprit que sont introduites des microstructures réalistes en termes de morphologie et d'orientation cristalline, et qu'on adopte un modèle de plasticité cristalline en grandes déformations basé sur les densités de dislocations. Ce choix permet de prendre en compte dans les lois de plasticité les interactions entre dislocations et défauts d'irradiations pour des conditions de chargements sévères. Ces lois sont introduites dans le code de calcul par éléments finis ZéBuLoN afin de réaliser des calculs d'agrégats polycristallins aux propriétés représentatives d'un élément de volume macroscopique. Les résultats obtenus sur un tel agrégat sont donc considérés comme une donnée élémentaire dans la manipulation des modèles de rupture fragile sur des structures. La nouvelle approche développée a un statut d'"approche locale micromécanique".

Mots clés : Agrégat polycristallin, approche micromécanique, 16MND5, aciers bainitiques, densités de dislocations, irradiation

Modelling of the plasticity and brittle failure of irradiated bainitic steels

ABSTRACT: Low alloy steels are used in various equipments of nuclear reactors. Subjected to neutron irradiation produced during the operation of reactors, these materials exhibit significant changes in their microstructure, especially with the formation of radiation defects as interstitial loops, void clusters and precipitates. These defects in interactions with dislocations lead to a hardening and embrittlement which are directly related to the received dose and neutron flux. The plastic behaviour of non-irradiated low alloy bainitic steels has been the object of several modellings based on observations from experiments and atomistic simulations. Some of them result from thesis supported by EDF and CEA, which describe different strategies for the micromechanical modelling of brittle failure. Improvements in this work come from the integration of new physical characteristics and the attention paid to the representativity of the microstructure: whereas realistic microstructures in terms of morphology and crystal orientations have been adopted, a dislocation density based constitutive model in the large deformation framework is used to describe crystal plasticity. This choice is justified by the need to take into account, in the constitutive modelling, the interactions between dislocations and irradiation defects under severe loading conditions. The plasticity laws have been implemented in the finite elements code ZéBuLoN in order to perform computations of polycrystalline aggregates. Such aggregates are representative volume elements. They thus provide the database required for the application of brittle failure models to structures. This multiscale character confers to the modelling the status of “micromechanical local approach of failure”.

Keywords : Polycrystalline aggregate, micromechanical approach, 16MND5, bainitic steels, dislocations density, irradiation



MINES ParisTech

ParisTech
INSTITUT DES SCIENCES ET TECHNOLOGIES
PARIS INSTITUTE OF TECHNOLOGY