

# Recalage à partir de mesures de champs de lois de plasticité cristalline pour les aciers des réacteurs nucléaires

A. Guery<sup>1</sup>, Q. Shi<sup>1,2</sup>, F. Latourte<sup>1</sup>, F. Hild<sup>2</sup>, S. Roux<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Département MMC, EDF R&D, {adrien.guery,felix.latourte}@edf.fr

<sup>2</sup> LMT, ENS Paris-Saclay / CNRS / Université Paris-Saclay, {qiwei.qshi,françois.hild,stephane.roux}@ens-paris-saclay.fr

**Résumé** — Des essais de traction réalisés *in situ* dans un microscope électronique à balayage ont été réalisés pour deux aciers (austénitique et bainito-ferritique). Les champs de déplacement superficiels sont caractérisés par corrélation d'images et la microstructure par EBSD (FIB-EBSD 3D pour la microstructure la plus fine). L'identification de paramètres d'écrouissage de loi de plasticité cristalline est réalisée pour ces deux matériaux par recalage avec une modélisation par éléments finis en s'appuyant sur les mesures cinématiques, et d'efforts appliqués.

**Mots clés** — plasticité cristalline, corrélation d'images numériques, recalage de modèles éléments finis

## 1. Introduction

Pour garantir l'exploitation des composants de Réacteurs à Eau Pressurisée (REP) en toute sûreté, il est primordial de comprendre les mécanismes d'endommagement et de rupture des matériaux métalliques utilisés dans leur fabrication. Une modélisation fine de ces mécanismes à l'échelle de la microstructure de ces matériaux exige une loi de comportement validée à cette échelle. L'objectif de cette étude est de proposer une méthode d'identification de paramètres de lois de plasticité cristalline basée sur une comparaison essai-calcul à l'échelle microstructurale. Pour ce faire, des mesures de champs cinématiques sont réalisées à la surface d'agrégats polycristallins au cours d'essais *in situ* dans un Microscope Electronique à Balayage (MEB), puis sont confrontées à ceux obtenus par la simulation de ces essais. Nous nous intéressons en particulier à deux familles de matériaux : les aciers austénitiques inoxydables, utilisés par exemple pour la fabrication des internes de cuve [1], et l'acier faiblement allié A508c13 (également connu sous la désignation 16MND5), utilisé pour la fabrication de la cuve [2]. Différentes hypothèses sont testées pour modéliser de manière réaliste la microstructure expérimentale. Dans le cas de la morphologie relativement simple des grains d'un acier austénitique, une première hypothèse mise en œuvre consiste à modéliser en 2D uniquement la microstructure surfacique déterminée à l'état non déformé. Dans le cas de la morphologie plus fine et complexe des grains d'un acier bainito-ferritique, la seconde hypothèse retenue consiste à modéliser en 3D la microstructure volumique déterminée *post-mortem* à l'état déformé. Enfin, une méthode de recalage du modèle par éléments finis permet avec l'une ou l'autre de ces hypothèses d'identifier les paramètres de la loi de plasticité cristalline choisie qui minimisent l'écart entre les champs mesurés et simulés.

## 2. Modélisation de microstructures expérimentales

Les champs cinématiques sont mesurés à la surface des deux matériaux étudiés par corrélation d'images numériques [3,4] à l'échelle de leur microstructure au cours d'essais de traction *in situ* [5]. Une modélisation réaliste de ces essais nécessite tout d'abord de reconstruire et de mailler la microstructure expérimentale sollicitée. Selon le matériau, deux modélisations différentes sont proposées.

## 2.1. Acier austénitique inoxydable A316LN

L'acier A316LN étudié présente une taille de grain de l'ordre de  $50\ \mu\text{m}$ . La région d'intérêt dans laquelle les mesures de champs ont été réalisées a pour dimension  $400 \times 400\ \mu\text{m}^2$ . La microstructure (orientations cristallographiques et joints de grains) dans cette région a été caractérisée en surface par EBSD (*Electron Back-Scattered Diffraction*), telle que présentée en Figure 1. La cartographie EBSD des joints de grains est ensuite segmentée en polygones, permettant alors de générer un maillage non-structuré constitué d'éléments triangulaires prenant appui sur ces polygones [6]. La taille caractéristique des éléments obtenus est de l'ordre de  $5,6\ \mu\text{m}$ . Ce maillage est utilisé par la suite dans un calcul par éléments finis en modélisation 2D avec l'hypothèse de contraintes planes. L'effet de la microstructure sous-jacente sur les champs surfaciques simulés est pris en compte en imposant les déplacements mesurés sur les bords de la région comme conditions aux limites.

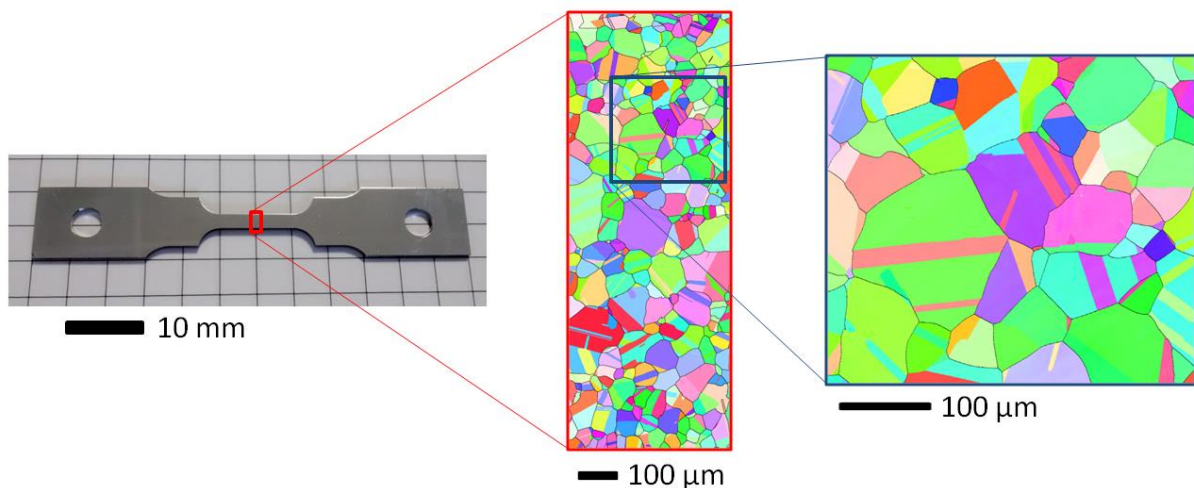


Figure 1 – Microstructure en surface dans la région d'intérêt (zoom de droite) caractérisée par EBSD

## 2.2. Acier faiblement allié A508c13

L'acier faiblement allié A508c13 présente une microstructure plus fine que celle de l'acier A316LN, avec une taille de grain de l'ordre de  $5\ \mu\text{m}$  à  $20\ \mu\text{m}$ , et avec deux phases principales qui sont bainitique et ferritique (à la hauteur de 25% volumique). Un volume de  $42 \times 41 \times 11,8\ \mu\text{m}^3$  de ce matériau a été caractérisé *post-mortem* à l'issue d'un essai de traction *in situ* par FIB-EBSD (Figure 2). Un maillage avec des éléments finis tétraédriques a ensuite été généré à partir de la microstructure réelle reconstruite. La configuration de la microstructure à l'état non déformé est alors une inconnue de la procédure d'identification [7]. La simulation de l'essai *in situ* est mise en œuvre à partir d'une première estimation de cette configuration. Les conditions aux limites cinématiques (également inconnues) sont estimées à partir des déplacements mesurés en surface sur les bords et extrudés dans le volume.

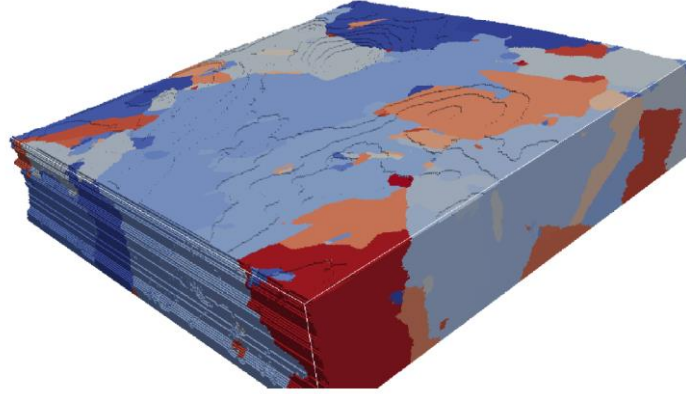


Figure 2 –Microstructure reconstruite par FIB-EBSD dans un volume de  $42 \times 41 \times 11,8 \mu\text{m}^3$

### 3. Loi de plasticité cristalline

La simulation des essais *in situ* est mise en œuvre avec le code éléments finis code\_aster. La loi de plasticité cristalline proposée par Méric et Cailletaud [8] est utilisée dans cette étude. Pour chaque système de glissement  $s$  du réseau cubique à faces centrées (pour l'acier austénitique) ou du réseau cubique centré (pour l'acier bainito-ferritique), cette loi définit des relations d'écoulement viscoplastique (1, 2), d'écrouissage isotrope (3) et cinématique (4)

$$\dot{\gamma}_s = \dot{p}_s \frac{\tau_s - c\alpha_s}{|\tau_s - c\alpha_s|} \quad (1)$$

$$\dot{p}_s = \left\langle \frac{|\tau_s - c\alpha_s| - r_s(p_s)}{k} \right\rangle_+^n \quad (2)$$

$$r_s = r_0 + q \left( \sum_{r=1}^{12} h_{sr} (1 - e^{-bp_r}) \right) \quad (3)$$

$$\dot{\alpha}_s = \dot{\gamma}_s - d\alpha_s \dot{p}_s \quad (4)$$

où  $c$ ,  $k$ ,  $n$ ,  $r_0$ ,  $q$ ,  $b$ ,  $d$  sont des paramètres dépendant du matériau et  $h_{sr}$  les coefficients de la matrice d'interaction entre systèmes de glissement. L'opérateur  $\langle \cdot \rangle_+$  retourne la partie positive de son argument. Un premier jeu de paramètres est obtenu en identifiant par homogénéisation les paramètres d'écrouissage isotrope avec le modèle de Berveiller et Zaoui [9], les autres paramètres étant fixés à des valeurs issues de la littérature.

### 4. Recalage de modèles éléments finis

La méthode proposée pour l'identification des paramètres  $\mathbf{p}$  de la loi de comportement est un recalage du modèle éléments finis visant à minimiser deux critères de moindres carrés [10] : l'un portant sur les champs de déplacement à l'échelle microstructurale, noté  $\chi_u$ , l'autre sur l'effort à l'échelle macroscopique, noté  $\chi_F$ , tels que la fonction coût globale à minimiser s'écrit

$$\chi_T^2(\mathbf{p}) = \chi_u^2 + \chi_F^2 \quad (5)$$

$$\chi_T^2(\mathbf{p}) = \frac{1}{2\eta_f^2 N_{dof} N_t} \sum_t \{\Delta \mathbf{u}_t\}^T [\mathbf{M}] \{\Delta \mathbf{u}_t\} + \frac{1}{\eta_F^2 N_t} \{\Delta \mathbf{F}\}^T \{\Delta \mathbf{F}\} \quad (6)$$

où  $\{\Delta \mathbf{u}_t\}$  est la différence au pas de temps  $t$  entre les déplacements nodaux mesurés et calculés à la surface de la microstructure,  $\{\Delta \mathbf{F}\}$  la différence à tous les pas de temps entre l'effort expérimental et celui calculé par homogénéisation.  $N_{dof}$  et  $N_t$  sont respectivement le nombre de degrés de liberté du maillage surfacique et le nombre de pas de temps.  $[\mathbf{M}]$  est la matrice de corrélation d'images, inversement proportionnelle à la matrice de covariance des degrés de liberté mesurés [11].  $\eta_f^2$  et  $\eta_F^2$  sont respectivement les variance du bruit d'acquisition des images MEB et du capteur d'effort, introduites de manière à normer le critère à minimiser.

#### 4.1. Cas d'une microstructure 2D monophasique

La fonction coût (6) est minimisée par rapport aux paramètres  $\mathbf{p}$  de la loi de manière itérative à l'aide d'un algorithme de Levenberg-Marquardt. Nous cherchons à identifier les paramètres d'érouissage isotrope de la loi de plasticité cristalline en conservant pour les autres leur valeur de référence [12]. Les paramètres  $r_0$  et  $q$  convergent rapidement vers le résultat final (Figure 3). La Figure 4 montre l'évolution des deux fonctions coûts  $\chi_u$  et  $\chi_F$  au cours des itérations : si l'identification permet d'améliorer le modèle à la fois en termes de champs de déplacements à l'échelle de la microstructure et de comportement macroscopique, l'erreur de modèle reste importante.

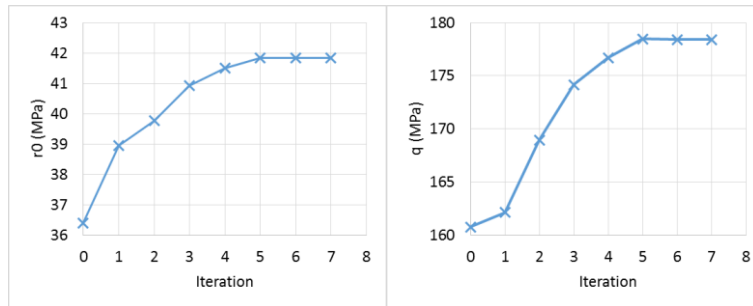


Figure 3 – Evolution des paramètres  $r_0$  et  $q$  d'érouissage isotrope

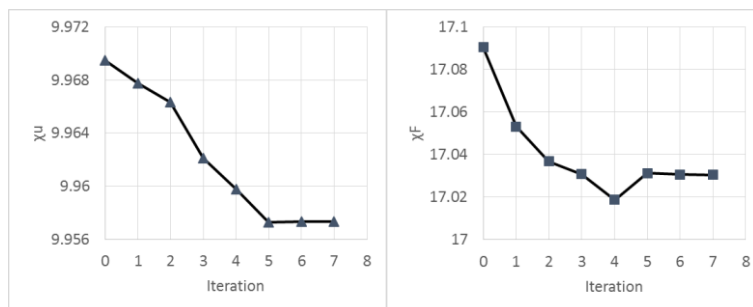


Figure 4 – Evolution des fonctions coûts au cours de l'identification

## 4.2. Cas d'une microstructure 3D biphasique

Dans le cas de la microstructure 3D, une étape supplémentaire dans l'algorithme de minimisation de la fonction coût (6) consiste à évaluer l'écart entre la microstructure déformée simulée avec l'estimation courante de  $\mathbf{p}$  et la microstructure déformée expérimentale. Si cet écart excède un critère de qualité donné, l'estimation de la microstructure à l'état non déformé est actualisée [13].

Deux identifications des paramètres  $r_0$  et  $q$  d'érouissage isotrope sont réalisés, les autres paramètres restant fixés à leur valeur de référence. Dans un cas, noté RQ, le même paramètre  $r_0$  est utilisé quelle que soit la phase. Dans l'autre cas, noté RQR, ce paramètre prend une valeur distincte selon de la phase : il est noté  $R_f$  pour la ferrite et  $R_b$  pour la bainite. La Figure 5 présente les résultats de ces deux identifications. La distinction entre les deux phases de la cisssion résolue critique initiale conduit à une valeur nettement plus élevée dans la bainite que dans la ferrite. Ce résultat est cohérent avec le fait que la bainite soit une phase plus dure que la ferrite. La valeur identifiée du paramètre  $q$  est sensiblement la même entre les deux identifications. L'identification RQR est celle qui conduit à la plus forte amélioration du modèle en termes d'accord sur les champs de déplacement à l'échelle de la microstructure (Figure 6).

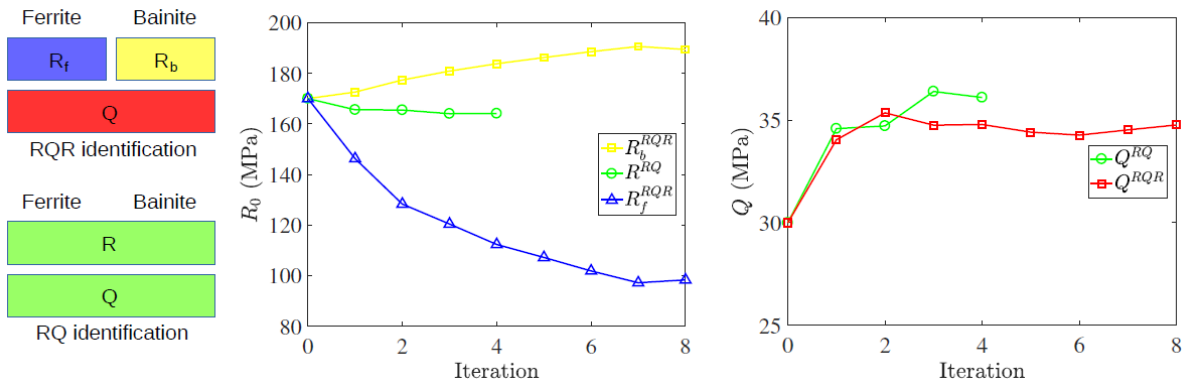


Figure 5 – Evolution des paramètres  $r_0$  et  $q$  dans le cas des identifications RQ et RQR

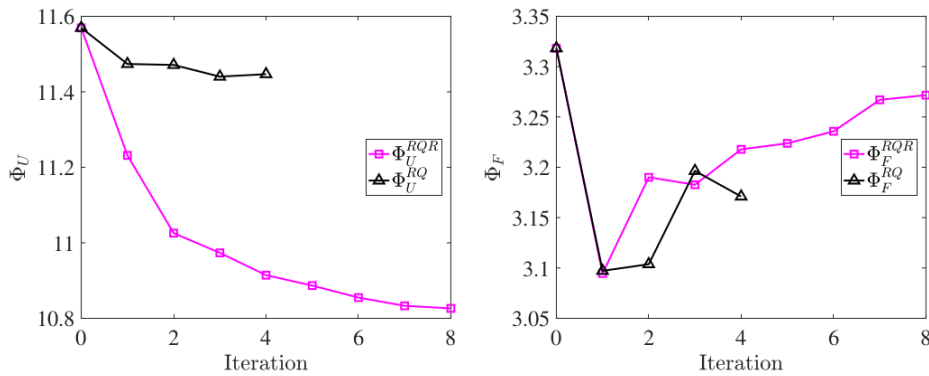


Figure 6 – Evolution des fonctions coûts dans le cas des identifications RQ et RQR

## 5. Conclusion

Cette étude a proposé une méthode d'identification des paramètres d'une loi de plasticité cristalline basée sur la comparaison de champs mesurés et calculés à la surface d'agrégats polycristallins. Selon la finesse et la complexité de la microstructure expérimentale, deux approches différentes ont été explorées pour décrire cette dernière. La première consiste à modéliser en 2D uniquement la microstructure surfacique tandis que la seconde consiste à modéliser en 3D la microstructure volumique connue uniquement à l'état déformé. Pour ces deux modélisations, la méthode d'identification proposée est mise en œuvre pour recalculer les paramètres d'écrouissage isotrope de la loi de plasticité cristalline utilisée. Néanmoins, l'écart à convergence entre la mesure et la prévision du modèle restant non négligeable dans les deux approches, des améliorations de la modélisation peuvent être envisagées, en utilisant par exemple d'autres lois de comportement.

## Références bibliographiques

- [1] J. Hure, S. El Shawish, L. Cizelj, B. Tanguy. Intergranular stress distributions in polycrystalline aggregates of irradiated stainless steel, *J. Nucl. Mater.*, 231-242, 2016.
- [2] J.P. Mathieu, K. Inal, S. Berveiller, O. Diard. A micromechanical interpretation of the temperature dependence of beremin model parameters for French RPV steel. *J. Nucl. Mater.*, 97-112, 2010.
- [3] H. Leclerc, J.N. Périé, S. Roux, F. Hild. Integrated digital image correlation for the identification of mechanical properties, *MIRAGE 2009, LNCS 5496*, 161-171, 2009.
- [4] Z. Tomičević, F. Hild, S. Roux. Mechanics-aided digital image correlation. *J. Strain Anal. Eng. Des.*, 330-343, 2013.
- [5] A. Guery, F. Hild, F. Latourte, S. Roux. Slip activities in polycrystals determined by coupling DIC measurements with crystal plasticity calculations, *Int.J. Plast.*, 249-266, 2016.
- [6] F. Latourte, C. Toulemonde, J.F. Rit, J. Sanahuja, N. Rupin, J. Ferrari, H. Perron, E. Bosso, A. Guery, J.M. Proix. The materials ageing platform: towards a toolbox to perform a wide range of research studies on the behavior of industrial materials, *PhotoMechanics Montpellier 2013*, 2013.
- [7] Q. Shi, F. Latourte, F. Hild, S. Roux. Backtracking depth-resolved microstructures for crystal plasticity identification – Part 1: Backtracking microstructures, *JOM*, 2810-2818, 2017.
- [8] L. Méric, P. Poubanne, G. Cailletaud. Single crystal modeling for structural calculations: Part 1 – Model Presentation. *J. Eng. Mater. Technol.*, 162-170, 1991.
- [9] M. Berveiller, A. Zaoui. An extension of the self-consistent scheme to plastically-flowing polycrystals. *J. Mech. Phys. Sol.*, 325-344, 1979.
- [10] F. Mathieu, H. Leclerc, F. Hild, S. Roux. Estimation of elastoplastic parameters via weighted FEMU and integrated-DIC. *Exp. Mech.*, 105-119, 2015.
- [11] G. Besnard, F. Hild, S. Roux. “Finite-Element” displacement fields analysis from digital images: Application to portevin-le chatelier bands. *Exp. Mech.*, 789-803, 2006.
- [12] A. Guery, F. Hild, F. Latourte, S. Roux. Identification of crystal plasticity parameters using DIC measurements and weighted FEMU, *Mech. Mater.*, 55-71, 2018.
- [13] Q. Shi, F. Latourte, F. Hild, S. Roux. Backtracking depth-resolved microstructures for crystal plasticity identification – Part 2: Identification, *JOM*, 2803-2809, 2017.