



### **Science Arts & Métiers (SAM)**

is an open access repository that collects the work of Arts et Métiers Institute of Technology researchers and makes it freely available over the web where possible.

This is an author-deposited version published in: <https://sam.ensam.eu>  
Handle ID: <http://hdl.handle.net/10985/10134>

#### **To cite this version :**

Karim INAL, Marcel BERVEILLER, Renaud MASSON, Raphaël PESCI - Distribution des contraintes dans l'acier bainitique 16MND5. Analyse expérimentale et modélisation polycristalline - Mécanique et Industries - Vol. 4, n°4, p.457-465 - 2003

Any correspondence concerning this service should be sent to the repository

Administrator : [scienceouverte@ensam.eu](mailto:scienceouverte@ensam.eu)





## Science Arts & Métiers (SAM)

is an open access repository that collects the work of Arts et Métiers ParisTech researchers and makes it freely available over the web where possible.

This is an author-deposited version published in: <http://sam.ensam.eu>  
Handle ID: <http://hdl.handle.net/null>

### To cite this version :

Raphaël PESCI, K; INAL, Marcel BERVEILLER, R. MASSON - Stress distribution in the 16MND5 bainitic steel. - .Mécanique & Industries n°4, p.457-465 - 2003

Any correspondence concerning this service should be sent to the repository

Administrator : [archiveouverte@ensam.eu](mailto:archiveouverte@ensam.eu)

# Distribution des contraintes dans l'acier bainitique 16MND5. Analyse expérimentale et modélisation polycristalline

## Stress distribution in the 16MND5 bainitic steel. Experimental analysis and polycrystalline modeling

Raphaël Pesci <sup>a,\*</sup>, Karim Inal <sup>a</sup>, Marcel Berveiller <sup>a</sup>, Renaud Masson <sup>b</sup>

<sup>a</sup> LPMM UMR CNRS 7554, École nationale supérieure d'arts et métiers, 4, rue Augustin Fresnel, Metz Technopôle, 57078 Metz cedex 3, France

<sup>b</sup> Électricité de France recherche et développement, département matériaux et mécanique des composants, site des Renardières, avenue des Renardières, Ecuelles, 77818 Moret sur Loing, France

### Résumé

La nature biphasée de l'acier bainitique 16MND5 (ferrite/cémentite) fait de la Diffraction des Rayons X (DRX) l'outil privilégié pour déterminer les états de contrainte dans la phase ferritique (méthode des  $\sin^2 \psi$ ). Couplés aux observations réalisées lors d'essais de traction (surface des éprouvettes et faciès de rupture), ces derniers ont permis d'établir des critères décrivant le comportement et l'endommagement du matériau à l'échelle cristallographique, aux points bas de la transition fragile-ductile ainsi qu'aux basses températures [ $-196$  °C;  $-60$  °C]. Au cours du chargement, l'endommagement est observé au Microscope Electronique à Balayage, tandis que les contraintes internes sont déterminées par DRX : l'état de contrainte dans la ferrite est inférieur à celui de la bainite (contrainte macroscopique), l'écart n'excédant pas 150 MPa. Un modèle polycristallin à plusieurs échelles est développé parallèlement aux mesures expérimentales : une formulation de type Mori-Tanaka est utilisée pour décrire le comportement élastoplastique d'un monocristal ferritique renforcé par des précipités de cémentite, le passage au polycristal étant réalisé par une approche autocohérente. La modélisation développée prend en compte l'influence de la température sur les états de contrainte dans chaque phase et inclut un critère de clivage (valeur critique de la contrainte normale aux plans {100}), qui traduit l'endommagement du matériau : elle permet ainsi de prédire le comportement réel de l'acier 16MND5 en fonction de la température, et de prendre en compte le mode de rupture qui est fragile à partir de  $-120$  °C. En outre, il est également possible de calculer les déformations des plans diffractants  $\varepsilon_{\varphi\psi}$ , qui peuvent être comparées à celles mesurées par DRX : cela permet d'évaluer les déformations par orientation cristallographique.

### Abstract

The 16MND5 bainitic steel being a two-phase material (ferrite/cementite), the X-Ray Diffraction (XRD) is the most efficient tool to determine the stress states into the ferritic phase ( $\sin^2 \psi$  method). The latter, coupled to the observations realized during tensile tests (specimen surface and facies), have permitted to establish criteria to describe the behavior and the damaging processes of the material on a crystallographic scale, in the lower part of the ductile-to-brittle transition region and at lower temperatures [ $-196$  °C;  $-60$  °C]. During the loading, the damage is observed with a Scanning Electron Microscope, while the internal stresses are determined by XRD: the stress states are less important in ferrite than in bainite (macroscopic stress), the difference not exceeding 150 MPa. A multi-scale polycrystalline model is developed concurrently with the experimental measurements: a Mori-Tanaka formulation is used to describe the elastoplastic behavior of a ferritic single crystal reinforced by cementite precipitates, while the transition to the polycrystal is achieved by a self-consistent approach. The developed modeling takes into account the temperature effects on the stress states in each phase and includes a cleavage criterion (critical value of the stress normal to {100} planes), which expresses the damage of the material: thus, it enables to predict the actual experimental behavior of the 16MND5 steel in relation to temperature, and to take into account the failure process which is fragile from  $-120$  °C. Besides, it is also possible to calculate the strains of the diffracting planes  $\varepsilon_{\varphi\psi}$ , which can be compared to those measured by XRD: this enables to evaluate the heterogeneity of the strains for each crystallographic orientation.

## 1. Introduction

La production d'énergie nucléaire s'est considérablement développée ces cinquante dernières années, grâce en partie à l'amélioration des conditions de sécurité, et tout particulièrement celles des structures, rendue possible par les progrès réalisés dans le domaine des systèmes de contrôle et de mesure ainsi que ceux de la mécanique des matériaux. Electricité De France (EDF) a lancé un vaste programme de recherche expérimental et numérique, afin d'analyser et de prédire le comportement et les mécanismes de rupture de l'acier de cuve de Réacteur à Eau Pressurisée (REP), et ceci en fonction de la température. Le travail présenté rentre dans le cadre de ce projet, avec pour principal objectif d'établir des critères décrivant le comportement et l'endommagement du matériau à l'échelle cristallographique, aux points bas de la transition fragile-ductile mais surtout aux basses températures [ $-196^{\circ}\text{C}$ ;  $-60^{\circ}\text{C}$ ]. Cet intervalle d'étude (domaine fragile) permet de caractériser les propriétés mécaniques de cet acier dans les conditions quasi-réelles d'utilisation (cuve du REP), car sous l'effet de l'irradiation, sa courbe de résilience est décalée vers les hautes températures.

Le matériau constituant la cuve est un acier bainitique 16MND5 (ferrite et cémentite), dont la microstructure complexe est composée notamment de lattes et de différents paquets de ferrite à l'intérieur de l'ancien grain austénitique. De nombreuses observations d'éprouvettes post-mortem ont permis d'étudier les phénomènes à l'origine de l'amorçage et de la croissance des fissures [1,2], mais elles ont rarement été réalisées à l'échelle microscopique. Dans les différentes bainites, la désorientation [3] et la taille des carbures sont des paramètres importants dont il faut tenir compte, car ils peuvent constituer un obstacle à la propagation de ces fissures. Même si certains modèles existent, la nature exacte des sites d'amorçage et les conditions de déclenchement restent à déterminer (essais mécaniques à basses températures), tout comme l'influence de la température.

La nature biphasée du matériau fait de la Diffraction des Rayons X (DRX) l'outil privilégié pour déterminer les états de contrainte dans chaque phase (méthode des  $\sin^2 \psi$ ) : basée sur la mesure des déformations élastiques des plans diffractants  $\varepsilon_{\varphi\psi}$ , elle permet de comprendre les phénomènes se produisant à l'échelle cristallographique. Peu de mesures de diffraction ont été effectuées sur la bainite, mais certains auteurs comme [4] ont étudié la distribution des contraintes dans la (ferrite/cémentite lamellaire). Cette technique peut également être utilisée pour l'analyse des textures et la détermination

des contraintes par orientations cristallographiques (méthode des blocs de cristaux).

La partie expérimentale de cette étude a donc pour objectif de coupler l'observation du matériau à différentes températures (essais de traction et fractographie) avec les valeurs de contraintes internes obtenues par DRX, afin d'établir des critères de comportement et d'endommagement pertinents. Toutes ces mesures permettent d'alimenter un modèle de comportement et d'endommagement à deux échelles : une modélisation de type Mori-Tanaka est d'abord utilisée pour décrire le comportement élastoplastique d'un monocristal biphasé, le passage au polycristal étant ensuite réalisé grâce à une approche autocohérente. Ce modèle polycristallin permet de calculer les états de contrainte dans chaque phase, qui peuvent être comparés à ceux obtenus par DRX : il est également capable de prendre en compte l'influence de la température et de prédire l'évolution de la texture cristallographique ainsi que la rupture du matériau, par l'intermédiaire d'un critère de clivage qui correspond à la valeur critique de la contrainte normale aux plans  $\{100\}$ .

## 2. Comportement et rupture de l'acier 16MND5

### 2.1. Présentation du matériau

Le matériau étudié est un acier bainitique 16MND5 (appellation U.S. : acier A508 classe 3) élaboré et mis en forme par forgeage, dont la composition chimique est donnée dans le Tableau 1. Utilisé dans la fabrication des cuves de REP, il a subi plusieurs traitements thermiques : deux austénisations à  $865$  et  $895^{\circ}\text{C}$  pendant  $4\text{h}40$  suivies de trempe à l'eau (traitement de qualité) pour obtenir une bainite, un revenu à  $630/645^{\circ}\text{C}$  pendant  $7\text{h}30$  pour améliorer la ténacité et un maintien en température à  $610^{\circ}\text{C}$  durant  $8\text{ h}$  (détensionnement) pour supprimer les contraintes résiduelles. La microstructure ainsi obtenue est une bainite revenue (Fig. 1). La matrice ferritique est renforcée par de nombreux carbures (taille de l'ordre de  $0,1\ \mu\text{m}$ ), que l'on retrouve également aux anciens joints de grains austénitiques : ce sont principalement des précipités de cémentite, en aiguille (bainite supérieure) ou de forme

Tableau 1  
Composition chimique de l'acier bainitique 16MND5

C	S	P	Mn	Si	Ni	Cr	Mo
0,159	0,008	0,005	1,37	0,24	0,70	0,17	0,50
V	Cu	Co	Al	N	O (ppm)	Sn (ppm)	As (ppm)
< 0,01	0,06	< 0,01	0,023	0,007	35–36	50	160

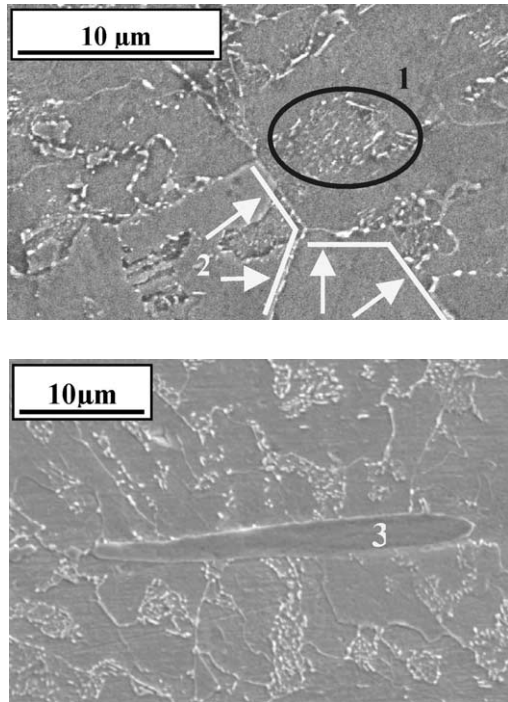


Fig. 1. Micrographies du MEB montrant la microstructure de la bainite. 1 – Ferrite avec des précipités de cémentite ; 2 – Anciens joints de grains austénitiques ; 3 – MnS.

sphérique (bainite inférieure). L'examen métallographique révèle également la présence de plusieurs types d'inclusions de sulfure de manganèse (MnS), dont la fraction volumique est inférieure à 1% : des inclusions sphériques dont le diamètre n'excède pas 20 µm, des inclusions allongées dont la taille est comprise entre 20 et 100 µm (certaines peuvent aller jusqu'à 350 µm) et des amas d'inclusions composés de 3 à 8 éléments.

La courbe de résilience de cet acier (Fig. 2) est présentée sur un large domaine de températures [−196 °C; 300 °C] : elle se caractérise par une grande dispersion des résultats dans la zone de transition fragile–ductile, qui varie entre −100 et 60 °C. Le travail présenté est tout particulièrement axé sur les basses températures (partie fragile), tous les essais de traction ayant été réalisés dans l'intervalle [−196 °C; −60 °C].

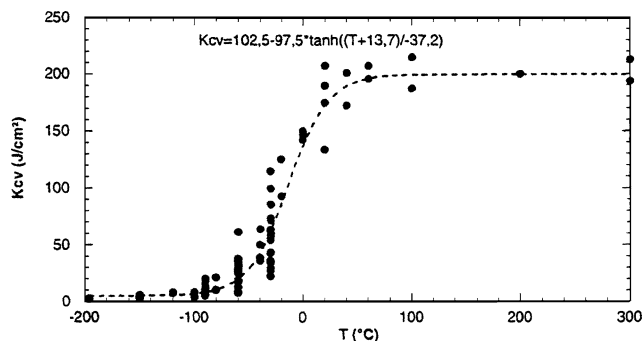


Fig. 2. Courbe de résilience [1].

## 2.2. Procédures expérimentales et résultats

Plusieurs essais de traction à basses températures ont permis de déterminer les propriétés mécaniques et les modes de rupture de l'acier 16MND5. Réalisés à l'aide d'une machine MTS de 10 kN équipée d'une enceinte thermique et d'un circuit de refroidissement par azote liquide (l'allongement étant mesuré par l'intermédiaire d'un extensomètre), ils ont montré que les états de contrainte augmentent et que la déformation à rupture est plus faible, lorsque la température diminue. Des éprouvettes plates ont été entièrement cartographiées (anciens grains austénitiques, « paquets bainitiques » et MnS), puis sollicités jusqu'à rupture. A chaque étape du chargement, les principaux sites ont été observés au Microscope Électronique à Balayage (MEB), afin de suivre l'évolution de l'endommagement et caractériser les éléments microstructuraux qui sont à l'origine de la germination des fissures, ainsi que ceux qui favorisent leur propagation ou au contraire constituent un obstacle à leur développement. L'observation au MEB a montré que les MnS allongés sont fissurés en de multiples endroits dès 1% de déformation : ils subissent ensuite une très forte décohésion, qui peut conduire à leur expulsion hors du matériau (Fig. 3(a)). L'apparition progressive de nombreuses lignes de glissement caractérise la plasticité cristalline (Fig. 3(b)) : elles sont plus marquées à −60 qu'à −196 °C, et peuvent traverser les différentes barrières microstructurales (anciens joints de grains austénitiques, paquets bainitiques, ...) ou être stoppées par ces dernières, et devenir tellement intenses qu'on ne parvient plus à distinguer la microstructure.

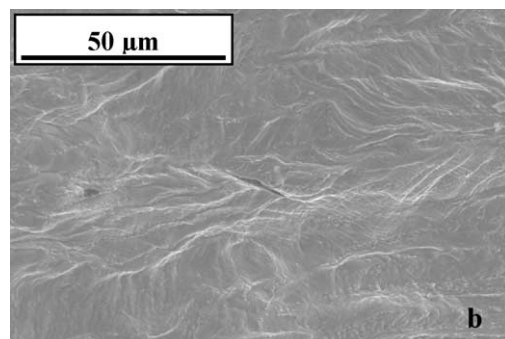
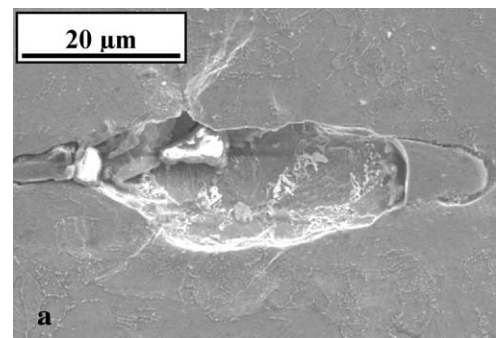


Fig. 3. (a) Rupture de MnS. (b) Lignes de glissement.

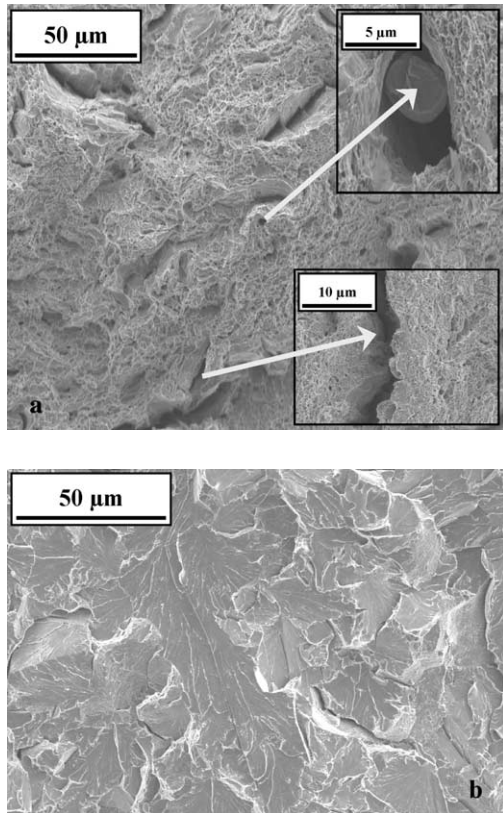


Fig. 4. (a) Rupture ductile à  $-60\text{ }^{\circ}\text{C}$ . (b) Rupture fragile à  $-196\text{ }^{\circ}\text{C}$ .

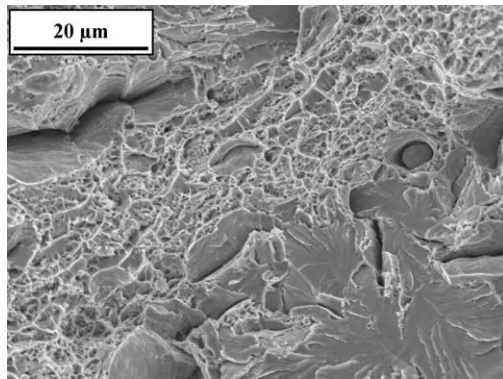


Fig. 5. Faciès de rupture mixte à  $-120\text{ }^{\circ}\text{C}$  (présence de facettes de clivage).

Le mode de rupture varie énormément avec la température. Il est ductile à  $-60\text{ }^{\circ}\text{C}$ , caractérisé par la présence de nombreuses cupules sur le faciès (Fig. 4(a)), de fissures assez larges qui présentent des traces de rupture fragile sur leurs parois, ainsi que de multiples cavités dont le diamètre est inférieur à  $40\text{ }\mu\text{m}$ , au fond desquelles se trouvent des résidus de MnS qui ont été fissurés avant de subir une forte décohésion. Au contraire, lors des essais de traction à plus basses températures (ici  $-196\text{ }^{\circ}\text{C}$  dans de l'azote liquide, mais également  $-150\text{ }^{\circ}\text{C}$ ), celui-ci devient fragile et se caractérise par des fissures et rivières de clivage (Fig. 4(b)). Enfin, aux températures intermédiaires [ $-120\text{ }^{\circ}\text{C}$ ;  $-90\text{ }^{\circ}\text{C}$ ], le faciès de rupture observé est mixte : il est principalement ductile, mais révèle

également de nombreuses facettes de clivage qui à défaut d'être majoritaires, sont réparties de façon assez uniforme (Fig. 5).

### 3. Analyse de contraintes par diffraction

La DRX est un outil d'analyse très performant, basée sur la mesure des déformations du réseau cristallin : elle donne une information sélective dans chaque phase, ce qui la rend indispensable pour les matériaux biphasés. Elle est utilisée pour analyser les textures cristallographiques (initiales ou après déformation) et surtout pour déterminer les états de contrainte dans chaque phase du matériau, après sollicitation (méthode des  $\sin^2\psi$  [5]). Ces derniers peuvent être déterminés en utilisant comme jauge de déformation, la distance interréticulaire des plans cristallographiques. La déformation élastique dans la direction de mesure résultant de la variation de cette distance  $d_0$  (matériau non contraint) à  $d$  (matériau contraint) est reliée à travers la loi de Bragg, à la mesure du déplacement  $\Delta 2\theta_{\phi\psi} = 2\theta_{\phi\psi} - 2\theta_0$  de la raie de diffraction correspondante :

$$\varepsilon_{\phi\psi} = \frac{d - d_0}{d_0} = \frac{\sin\theta_0}{\sin\theta} - 1 \approx -\frac{1}{2} \cotan\theta_0 \Delta 2\theta$$

Les déformations des plans diffractants  $\varepsilon_{\phi\psi}$  pour plusieurs orientations cristallines, en relation avec les angles de mesure  $\phi$  et  $\psi$ , correspondent à la moyenne sur le volume diffractant des déformations élastiques des grains, projetée sur la direction  $\phi\psi$  de mesure. Le traitement des courbes  $\varepsilon_{\phi\psi} = f(\sin^2\psi)$  permet ensuite de calculer les contraintes dans la phase, par l'intermédiaire des constantes élastiques radiocristallographiques [5].

Les mesures ont été effectuées avec un diffractomètre Seifert XRD 3003 PTS équipé d'un détecteur ponctuel, d'un monochromateur plan secondaire en graphite et de fentes de Soller arrières verticales. Les analyses de contrainte ont été réalisées sur les plans  $\{211\}$  de la ferrite avec une anticathode de chrome, dans le sens longitudinal des éprouvettes ( $\phi = 0^\circ$ ). Les pics de diffraction obtenus pour une éprouvette pré-déformée lors d'un essai de traction à  $-150\text{ }^{\circ}\text{C}$ , sont présentés à la Fig. 6.

La fraction volumique des précipités de cémentite étant trop faible pour y effectuer des mesures, les contraintes internes dans cette phase  $\sigma_{\text{Fe}_3\text{C}}^I$  sont déduites grâce à l'hypothèse :

$$\sigma = f_{\text{Fe}}\sigma_{\text{Fe}}^I + f_{\text{Fe}_3\text{C}}\sigma_{\text{Fe}_3\text{C}}^I$$

où  $f_{\text{Fe}}$  et  $f_{\text{Fe}_3\text{C}}$  sont respectivement les fractions volumiques de ferrite et de cémentite, et  $\sigma$  la contrainte macroscopique [6]. Les contraintes internes dans la ferrite  $\sigma_{\text{Fe}}^I$  sont obtenues en reportant sur la courbe macroscopique au dernier point de charge (Fig. 7), les contraintes résiduelles déterminées dans la ferrite  $\sigma_{\text{Fe}}^{IR}$  après décharge ( $\sigma = 0$ ). Les états de contrainte obtenus à  $-60\text{ }^{\circ}\text{C}$  sont représentés sur la Fig. 8.

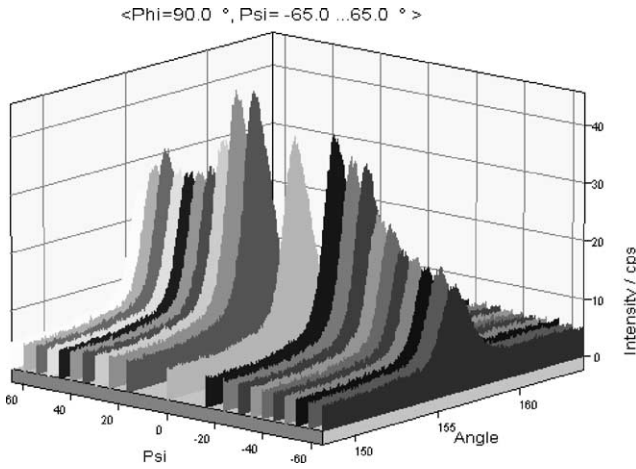


Fig. 6. Pics de diffraction pour les différents  $\psi$  (psi) considérés obtenus pour une éprouvette pré-déformée lors d'un essai de traction à  $-150^\circ\text{C}$ .

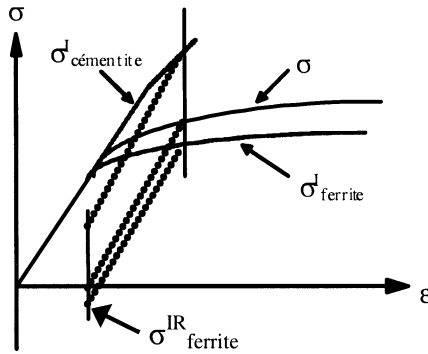


Fig. 7. Détermination des contraintes internes dans chaque phase.

La DRX montre donc que la ferrite est en compression à basses températures, et qu'elle garde des valeurs de contrainte proches de celles de la bainite (contrainte macroscopique), puisque l'écart est de l'ordre de 105 MPa (il peut aller jusqu'à 150 MPa à  $-196^\circ\text{C}$ ) : c'est un résultat qui s'explique par le fort pourcentage de ferrite (95 %) présent dans le matériau. Cette différence peut être beaucoup plus importante dans d'autres matériaux, comme les aciers duplex corroyés (200 MPa [7]) et la perlite (400 MPa [4]) qui contiennent moins de ferrite. La cémentite atteint des valeurs de contrainte beaucoup plus élevées (elle est beaucoup plus chargée : 1245 MPa). On a donc :

$$\sigma_{\text{Fe}_3\text{C}}^I < \sigma \ll \sigma_{\text{Fe}_3\text{C}}^I$$

Ce type de résultats a été confirmé expérimentalement par [4], directement dans la cémentite de la perlite (rayonnement synchrotron).

La mesure des déformations  $\varepsilon_{\varphi\psi} = f(\sin^2 \psi)$  pour les plans {211} dans la direction de traction après décharge (Fig. 9), montre que la pente moyenne obtenue est négative, car elle est en relation avec l'état de compression dans la ferrite. En outre, elle révèle l'existence d'un écart à la loi des  $\sin^2 \psi$  : des ondulations assez marquées (conformes à celles obtenues par [8,9]) traduisent l'hétérogénéité de la déformation élastique liée à l'anisotropie plastique des grains. Elles

$-60^\circ\text{C}$		
Déformation (%)	6,5	11,9 (rupture)
$\sigma_{\text{Fe}}^{IR}$ (MPa)	$-80 \pm 20$	$-105 \pm 30$
$\sigma$ (MPa)	621	650
$\sigma_{\text{Fe}}^I$ (MPa)	541	545
$\sigma_{\text{Fe}_3\text{C}}^I$ (MPa)	1074	1245

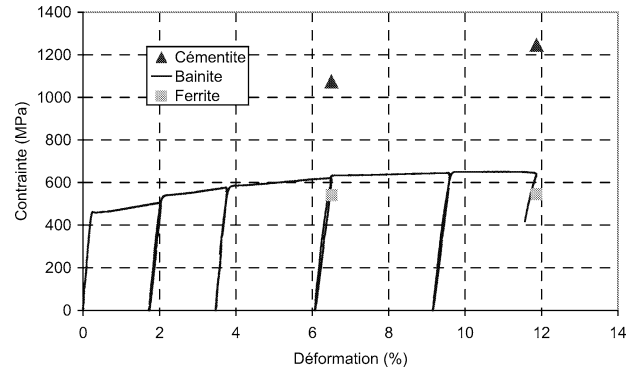


Fig. 8. Distribution des contraintes dans l'acier 16MND5 lors d'un essai de traction à  $-60^\circ\text{C}$ .

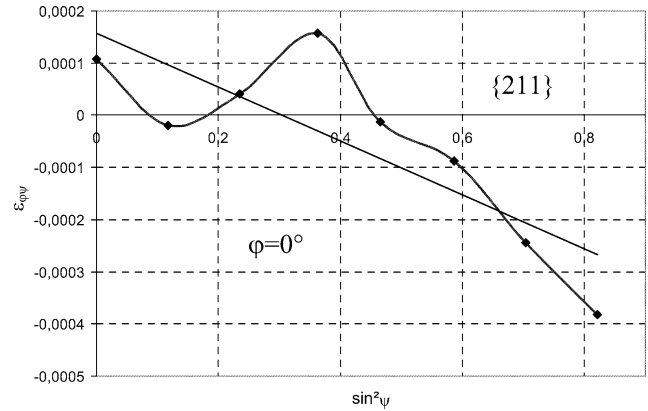


Fig. 9. Déformations  $\varepsilon_{\varphi\psi} = f(\sin^2 \psi)$  mesurées par DRX après décharge (essai de traction à  $-150^\circ\text{C}$  : 5 % de déformation appliquée).

sont exacerbées par la texture cristallographique, qui repositionne les grains autour d'orientations idéales. Elles sont également plus marquées à très basses températures (à partir de  $-120$  et  $-150^\circ\text{C}$ ), car la limite d'élasticité est plus élevée : les grains ont donc alors une plus grande déformation élastique.

#### 4. Modélisation du comportement et de l'endommagement de l'acier 16MND5

Un modèle de comportement et d'endommagement à double transition d'échelle (Fig. 10) est développé parallèlement à la caractérisation expérimentale du matériau (polycristal).

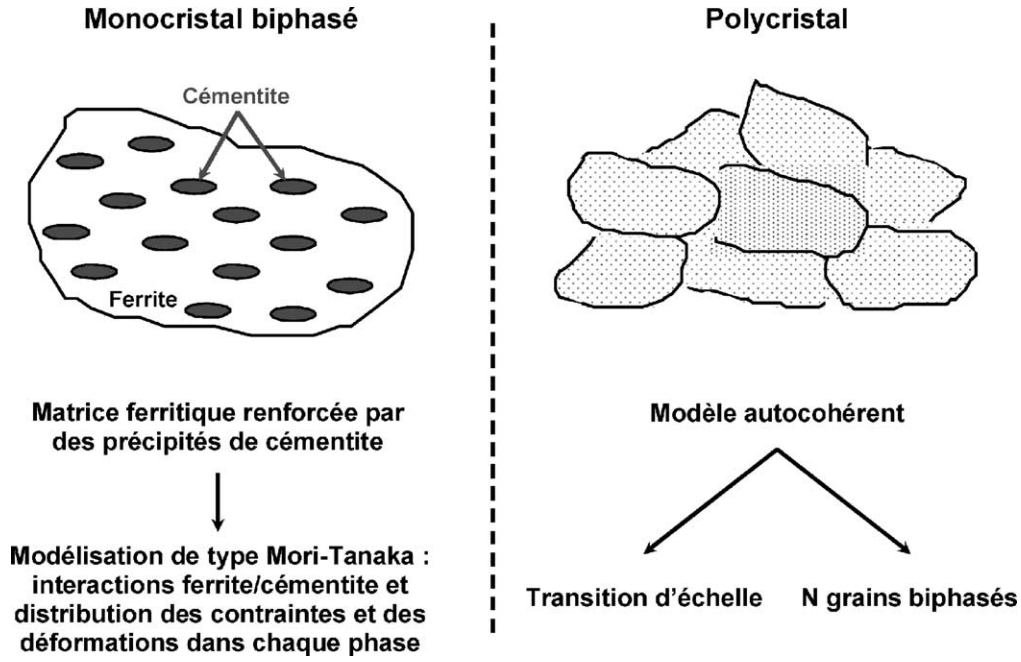


Fig. 10. Modélisation polycristalline à deux échelles.

#### 4.1. Monocrystal

La loi de comportement d'un monocrystal ferritique est définie par la relation

$$\dot{\sigma}_{ij} = l_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl}^t$$

où  $l_{ijkl}$  est le module tangent élasto-plastique défini par :

$$l_{ijkl} = \left( C_{ijkl} - \sum_h \sum_g C_{ijst} R_{st}^h (R_{mn}^g C_{mnop} R_{op}^h + h^{gh})^{-1} \times R_{qr}^g C_{qrkl} \right)$$

$C_{ijkl}$  est le tenseur de rigidité élastique,  $R_{ij}^g$  le tenseur d'orientation décrivant les systèmes de glissement  $g$  et  $h^{gh}$  la matrice d'écrouissage [10]. La déformation plastique de la ferrite est engendrée par du glissement cristallographique : l'entrée en plasticité obéit à la loi de Schmid et les systèmes de glissement actifs sont déterminés grâce au critère énergétique de Franciosi-Zaoui (la combinaison de systèmes actifs à retenir est celle qui minimise cette énergie) :

$$W = \frac{1}{2} \sum_h \sum_g H^{gh} \dot{\gamma}^h \dot{\gamma}^g - \sum_g R_{ij}^g C_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl}^t \dot{\gamma}^g + \text{cst} \quad \text{où}$$

$$H^{gh} = h^{gh} - R_{ij}^g C_{ijkl} R_{kl}^h$$

Ce dernier prend en compte les paramètres de la matrice d'écrouissage, les vitesses de glissement de chaque système  $\dot{\gamma}^g$  et les caractéristiques élastiques de la ferrite.

Une modélisation de type Mori-Tanaka est ensuite utilisée pour décrire le comportement élastoplastique d'un monocrystal cubique centré biphasé, grâce à une formulation matrice ferritique/inclusions de cémentite. Le comportement

élastique des deux phases est supposé identique (la cémentite reste élastique durant tout le chargement). Ce modèle conduit à une relation du type  $\dot{\sigma} = l_{\text{Fe}/\text{Fe}_3\text{C}} \dot{\epsilon}^t$ , qui relie l'état de contrainte à la déformation appliquée dans le repère du monocrystal.  $l_{\text{Fe}/\text{Fe}_3\text{C}}$  est le module tangent élastoplastique biphasé :

$$l_{\text{Fe}/\text{Fe}_3\text{C}} = [l_{\text{Fe}} + f(C_{\text{Fe}_3\text{C}} T - l_{\text{Fe}})] [(1-f)I + fT]^{-1}$$

$C_{\text{Fe}_3\text{C}}$  et  $l_{\text{Fe}}$  sont respectivement les caractéristiques élastiques et élastoplastiques de chaque phase,  $f$  est la fraction volumique de précipités de cémentite et  $T$  la solution du problème de l'inclusion plastique [11], définie à l'aide du tenseur d'Eshelby  $S^{\text{Esh}}$  et appliquée au modèle de Mori-Tanaka (le milieu de référence considéré étant la ferrite) :

$$T = [I + S^{\text{Esh}} l_{\text{Fe}}^{-1} (C_{\text{Fe}_3\text{C}} - l_{\text{Fe}})]^{-1}$$

Le comportement du monocrystal biphasé a été simulé en traction (Fig. 11), la plasticité de la ferrite étant définie par une cission critique de 260 MPa et une matrice d'écrouissage réduite à deux termes  $h_1 = 100$  MPa (auto-écrouissage) et  $h_2 = 1,2h_1$  (écrouissage latent). La fraction volumique de cémentite est fixée à 5%, les systèmes de glissement considérés sont au nombre de 48 ( $\{110\}\langle 111 \rangle$  et  $\{211\}\langle 111 \rangle$ ) et les constantes élastiques sont les suivantes :  $C_{11} = 237,4$ ,  $C_{12} = 134,7$  et  $C_{44} = 116,4$  GPa. Enfin, l'orientation du cristal par rapport au repère de sollicitation est définie par trois angles d'Euler  $\varphi_1$ ,  $\phi$  et  $\varphi_2$  (dans le cas considéré :  $21^\circ$ ,  $103^\circ$  et  $304^\circ$ ), qui sont réactualisés après chaque incrément de déformation, tout comme les cissions critiques et le module tangent élastoplastique.

La ferrite garde des valeurs de contrainte proches de celles de la bainite, alors que la cémentite est beaucoup plus chargée (Fig. 11(a)). L'état de contrainte de cette dernière



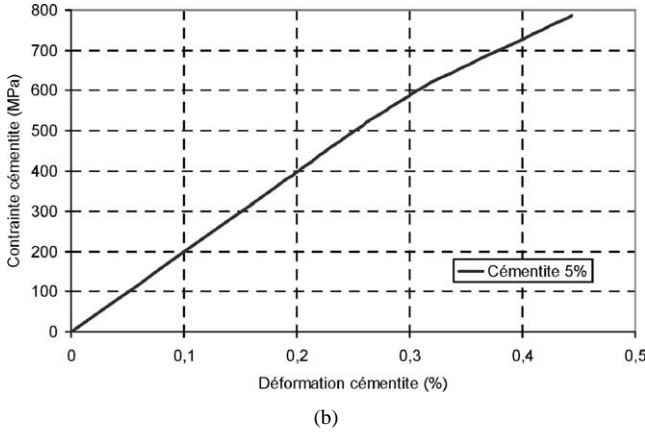
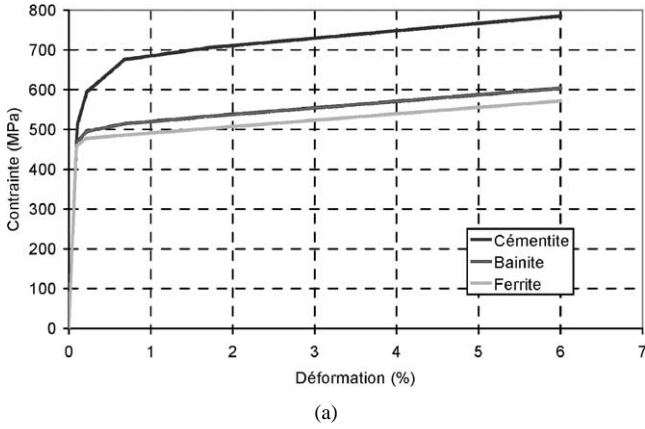


Fig. 11. (a) États de contrainte dans chaque phase. (b) Comportement de la cémentite.

semble saturer, bien que son comportement soit considéré comme purement élastique : toutefois, la représentation de l'évolution de la contrainte dans la cémentite en fonction de la déformation dans cette même phase (Fig. 11(b)) confirme bien que la cémentite reste parfaitement élastique. En fait, la cémentite ne se déforme que très peu (0,45 pour 6% de déformation macroscopique), car c'est la ferrite qui accommode la déformation imposée.

#### 4.2. Polycrystal

Le passage au polycrystal est réalisé grâce à une approche autocohérente [12]. La transition d'échelle permet d'obtenir une loi de comportement macroscopique :

$$\dot{\Sigma} = L \dot{E} \quad \text{et} \quad L = \overline{l_{Fe/Fe_3C} [I + S_{Esh} L^{-1} (l_{Fe/Fe_3C} - L)]^{-1}}$$

C'est une équation implicite (une moyenne sur tous les monocristaux biphasés), qui se résout par une succession d'itérations conduisant à la convergence de la solution. Le principal intérêt de ce modèle réside dans le fait que seulement trois paramètres ont besoin d'être identifiés pour reproduire exactement les résultats expérimentaux : la cission critique  $\tau_c^g$ , qui prend en compte le durcissement par précipitation et permet de faire varier la limite d'élasticité, ainsi que  $h_1$  et  $h_2$ , qui ont une influence sur la pente d'écrouissage. Pour

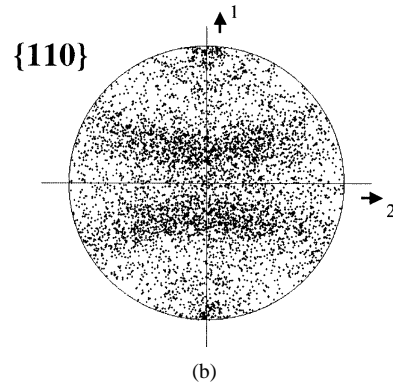
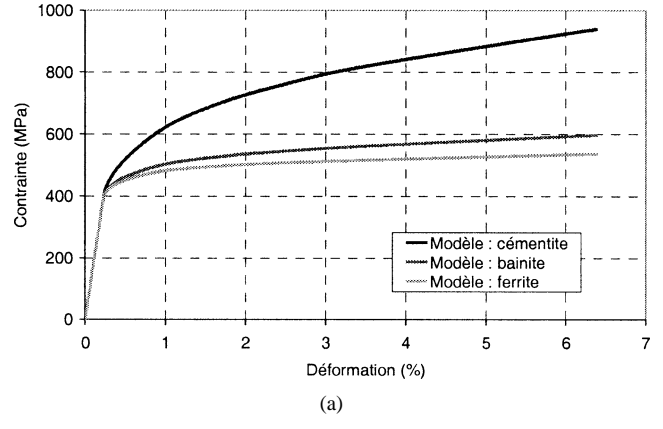


Fig. 12. (a) États de contrainte dans le polycrystal ( $-60^\circ\text{C}$ ). (b) Texture cristallographique simulée (traction).

un essai de traction à  $-60^\circ\text{C}$  par exemple, les paramètres ont été identifiés comme suit (Fig. 12(a)) :  $\tau_c^g = 276$  MPa,  $h_1 = 225$  MPa et  $h_2 = 1,2h_1 = 270$  MPa.

Les résultats présentés ont été obtenus pour 1000 grains biphasés en traction axisymétrique. Le choix du modèle polycristallin est donc pertinent et bien adapté, puisqu'il traduit parfaitement les états de contrainte dans chaque phase, ainsi que les écarts observés expérimentalement par DRX (la ferrite reste proche de la bainite et la cémentite atteint des valeurs de l'ordre de 1000 MPa pour 6% de déformation totale) : cela permet de valider une première fois le modèle. Il permet également de prédire correctement l'évolution des textures cristallographiques (en effet, la Fig. 12(b) montre la figure de pôle  $\{110\}$  d'une texture de traction tout à fait classique obtenue après 40% de déformation).

Le modèle prend également en compte l'influence de la température en identifiant seulement le paramètre  $\tau_c^g$  dans chaque cas ( $\tau_c^g = 350, 325$  et  $300$  MPa à  $-150, -120$  et  $-90^\circ\text{C}$ ) : les états de contrainte calculés sont plus grands lorsque la température diminue (Fig. 13(a)), ce qui est en accord avec les résultats expérimentaux. Ces derniers ont également montré que la pente d'écrouissage reste identique durant tous les essais : les deux paramètres  $h_1$  et  $h_2$  ont donc été choisis constants.

La température joue également un rôle important sur le critère de rupture introduit dans le modèle. Etant clairement

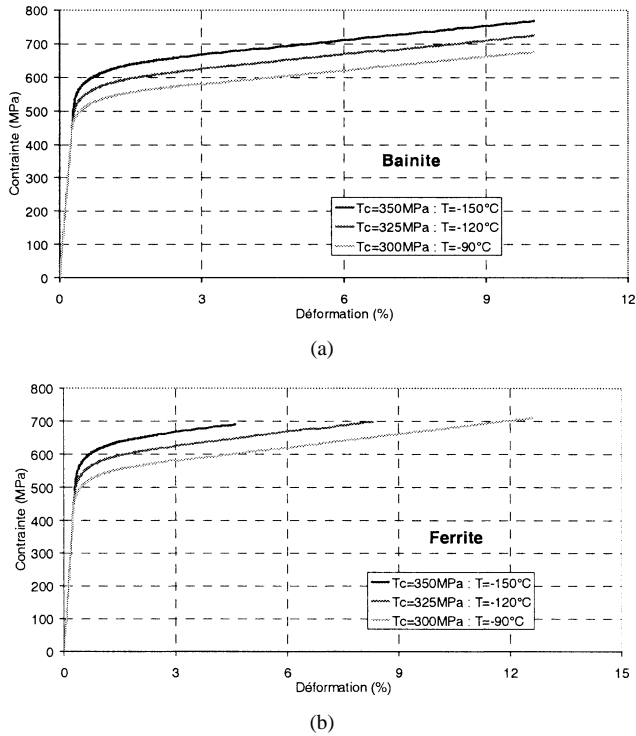


Fig. 13. Influence de la température sur le comportement du matériau (a) et les états de contrainte dans la phase ferritique lors de la rupture (b).

établi que le clivage survient de façon normale aux plans  $\{100\}$  du cristal de ferrite, le modèle peut donc prévoir en particulier dans chaque grain, l'évolution de la contrainte normale à ces plans :

$$\sigma_{\{100\}} = \sum_{i,j} n_i \sigma_{ij} n_j$$

$n_i$  étant la normale aux trois plans de la famille  $\{100\}$ . [13] a identifié expérimentalement un seuil pour la propagation du clivage dans un grain de ferrite (aciers duplex), qui correspond à une valeur critique de cette contrainte  $\sigma_{\{100\}}^c = 465 \text{ MPa}$ . Certains grains l'atteignent plus rapidement que d'autres, en fonction de leur orientation cristallographique : la rupture a donc lieu lorsque suffisamment de grains ont atteint cette valeur, ce qui survient plus rapidement à basses températures (Fig. 13(b)). Ce nombre de grains a été identifié dans le modèle (7 %), afin de retrouver les états de contrainte et les déformations à rupture obtenus expérimentalement à  $-150$ ,  $-120$  et  $-90^\circ \text{C}$  : les résultats montrent que la contrainte à rupture dans la ferrite reste constante pour ces températures.

Enfin, le modèle est capable de calculer les déformations  $\varepsilon_{\varphi\psi} = f(\sin^2 \psi)$  durant le chargement (plans  $\{211\}$ , dans la direction de traction  $\phi = 0^\circ$ ), par une opération de moyenne des déformations élastiques de chaque grain, et de projection normale aux plans diffractants (Fig. 14). Des analyses de contraintes in-situ vont être réalisées à froid [ $-160^\circ \text{C}$ ;  $-60^\circ \text{C}$ ] et la décharge va être introduite dans la modélisation, afin de pouvoir comparer les ondulations obtenues par DRX (charge et décharge) à celles reproduites

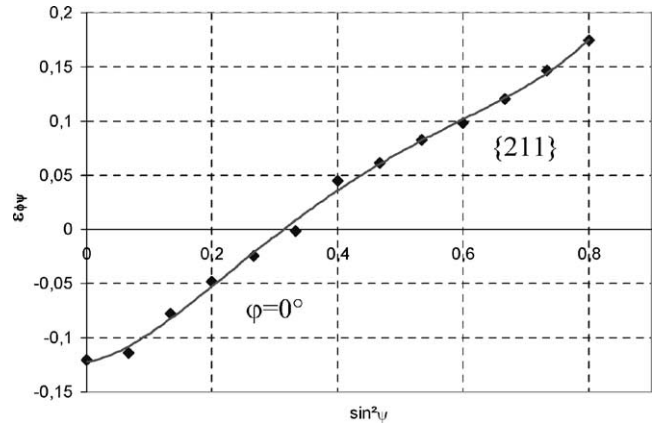


Fig. 14. Déformations  $\varepsilon_{\varphi\psi} = f(\sin^2 \psi)$  calculées par le modèle durant le chargement (essai de traction à  $-150^\circ \text{C}$  : 15 % de déformation appliquée).

par le modèle : cela va donc nous permettre de valider notre modèle en contraintes, à l'échelle des orientations cristallographiques.

## 5. Conclusions

Plusieurs essais de traction ont été réalisés à des températures comprises entre  $-196$  et  $-60^\circ \text{C}$  : couplés à l'observation au MEB et à l'analyse de contrainte par DRX, ils ont déjà permis d'alimenter un modèle de comportement et d'endommagement développé parallèlement à toutes ces mesures. De nombreux essais in-situ complémentaires vont permettre d'analyser l'influence de la température sur le mode de rupture : à l'aide d'une petite machine de traction/compression instrumentée en température (pouvant atteindre des températures comprises entre  $-160$  et  $300^\circ \text{C}$ ) et placée directement dans l'enceinte du MEB ou sur le goniomètre de diffraction, il va désormais être possible d'étudier l'initiation du clivage, de mesurer les déformations  $\varepsilon_{\varphi\psi} = f(\sin^2 \psi)$  et de déterminer les états de contraintes dans le matériau (afin d'associer à chaque mécanisme observé, une valeur de contrainte), sans effectuer de décharge préalable. La modélisation polycristalline est déjà très performante, puisqu'elle reproduit correctement le comportement et l'endommagement du matériau pour chaque température. Elle va encore être améliorée grâce aux essais in-situ, qui vont nous permettre d'établir de nouveaux critères d'endommagement cristallographiques (en particulier d'initiation et de propagation de fissures), et d'améliorer ainsi la base de données expérimentale.

## Remerciements

Les auteurs tiennent à remercier le département Matériaux et Mécanique des Composants du centre de recherche d'EDF situé sur le site des Renardières, et en particulier Gilles Rousselier.

## Références

- [1] S. Renevey, Approches globale et locale de la rupture dans le domaine de transition fragile-ductile d'un acier faiblement allié, Thèse, Université de Paris XI, Orsay, 1997.
- [2] T. Narström, M. Isacson, Microscopic investigation of cleavage initiation in modified A508B pressure vessel steel, *Mater. Sci. Eng. A* 271 (1999) 224–231.
- [3] A. Lambert, Rupture par clivage de microstructures d'aciers bainitiques obtenues en conditions de soudage, Thèse, École Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2001.
- [4] M. Belassel, Etude de la distribution des contraintes d'ordre I et II par diffraction des rayons X dans un acier perlitique, Thèse, École Nationale Supérieure d'Arts et Métiers de Paris, 1994.
- [5] V. Hauk, Structural and Residual Stress Analysis by Nondestructive Methods, Elsevier, Amsterdam, 1997.
- [6] R. Pesci, K. Inal, M. Berveiller, J.-L. Lebrun, Internal stress analysis for the damage study of a 16MND5 bainitic steel, in: A.M. Dias, J. Pina, A.C. Batista, E. Diogo (Eds.), Proceedings of the 6th European Conference on Residual Stresses, Trans Tech Publications, Coimbra, Portugal, 2002, pp. 641–646.
- [7] K. Inal, P. Gergaud, M. François, J.-L. Lebrun, X-ray diffraction methodologies of macro and pseudo-macro stress analysis in a textured duplex stainless steel, *Scand. J. Metallurgy* 8 (1999) 139–150.
- [8] J. Krier, Influences des hétérogénéités élasto-plastiques sur les contraintes du deuxième ordre dans les polycristaux métalliques mono- et polyphasés : calculs autocohérents – Mesures par diffraction des rayons X, Thèse, Université de Metz, 1993.
- [9] K. Inal, Etude de l'hétérogénéité des contraintes résiduelles et appliquées dans un acier austéno-ferritique : modélisation polycristalline et analyse expérimentale par diffraction des rayons X, Thèse, Université Paris XI, Orsay, 1996.
- [10] C. Schmitt, P. Lipinski, M. Berveiller, Micromechanical modeling of the elastoplastic behavior of polycrystals containing precipitates—Application to hypo- and hyper-eutectoid steels, *Int. J. Plasticity* 13 (1997) 183–199.
- [11] J.D. Eshelby, The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion and related problems, in: Proceedings of the Royal Society of London, Vol. A241, 1961, p. 155.
- [12] M. Berveiller, A. Zaoui, An extension of the self-consistent scheme to plastically flowing polycrystals, *J. Mech. Phys. Solids* 26 (1976) 325–344.
- [13] L. M' Cirdi, Comportement et endommagement sous sollicitation mécanique d'un acier austéno-ferritique moulé vieilli, Thèse, École Nationale Supérieure d'Arts et Métiers de Paris, 2000.