

# Couplage entre mesures de champs et calculs de plasticité cristalline à la surface de polycristaux d'acier austénitique

A. Guery<sup>a</sup>, F. Hild<sup>b</sup>, F. Latourte<sup>a</sup>, S. Roux<sup>b</sup>

- a. EDF R&D, Site des Renardières, avenue des Renardières - Ecuelles,  
F-77818 Moret-sur-Loing  
[adrien.guery, felix.latourte]@edf.fr
- b. LMT-Cachan (ENS Cachan / CNRS / Université Paris-Saclay)  
61 avenue du Président Wilson, F-94235 Cachan  
[hild, stephane.roux]@lmt.ens-cachan.fr

## Résumé :

*Des mesures de champs 2D sont réalisées par Corrélation d'Images Numériques (CIN) à la surface de polycristaux d'acier austénitique 316LN à partir d'une série d'images acquises au Microscope Electronique à Balayage (MEB) au cours d'essais de traction in-situ. La corrélation d'images utilise dans cette étude un maillage éléments finis non-structuré s'appuyant sur les interfaces de la microstructure et construit à partir d'une analyse EBSD. La simulation de chaque essai avec un modèle local de plasticité cristalline est ensuite réalisée en utilisant ce même maillage et les déplacements mesurés sur le bord du domaine comme conditions aux limites. Différentes comparaisons entre la mesure et la simulation peuvent alors être menées, que ce soit en termes de champs cinématiques mais aussi de systèmes de glissement activés. Enfin, une méthode inverse d'identification des paramètres de loi est proposée, se basant sur le recalage à la fois des champs de déplacements locaux et du comportement homogène du matériau.*

## Abstract:

*2D kinematic measurements are performed by Digital Image Correlation (DIC) on the surface of 316LN austenitic steel polycrystals from a sequence of images acquired using a scanning electron microscope during in-situ tensile tests. Digital image correlation uses in this study an unstructured finite element mesh taking as support the microstructure boundaries and built thanks to an EBSD analysis. The simulation of each tensile test with a local crystal plasticity model is then performed using this same mesh and the nodal displacements measured on the edges as boundary conditions. Several comparisons between the experiment and the simulation can then be carried out, in terms of kinematic fields but also of activated slip systems. Last, an inverse identification method is proposed for the identification of the sought constitutive parameters, based on the minimization of both displacement fields at the microscale and macroscopic effective behavior.*

## Mots clefs : Corrélation d'images numériques ; Identification ; Plasticité Cristalline

### 1 Introduction

Pour étudier le comportement et la durée de vie des composants des réacteurs des centrales nucléaires, des modélisations multi-échelles ont été proposées dans le cadre du projet européen PERFORM 60 mené par EDF R&D [1]. Une échelle importante dans ces modélisations est celle des polycristaux, car elle est pertinente pour étudier les mécanismes de dégradation des matériaux [2-4]. Si des modèles ont été développés pour décrire finement le comportement des matériaux à cette échelle [5], leur validation reste aujourd'hui difficile [6]. Dans cette étude, une méthode pour comparer des champs cinématiques mesurés à la surface de polycristaux au cours d'essais réalisés *in-situ* dans un MEB et ceux issus de la simulation de ces essais est proposée. Il est alors possible de comparer les champs cinématiques mesurés et simulés mais aussi l'activité des systèmes de glissement. Cette comparaison permet dans un premier temps de valider les différentes hypothèses adoptées pour modéliser la microstructure expérimentale partiellement connue ainsi que la loi de comportement du matériau choisie. L'objectif est dans un second temps d'identifier les paramètres de la loi de comportement offrant une réponse du modèle optimisée à la fois à l'échelle de la microstructure et à l'échelle du matériau homogène.

### 2 Mesures de champs par CIN

Pour obtenir des champs cinématiques 2D à la surface de polycristaux d'acier austénitique 316LN, une série d'images a été acquise au MEB au cours d'essais de traction monotone *in-situ*. Les mesures de champs sont réalisées entre deux images consécutives par une méthode globale de CIN [7,8], aidée par une régularisation mécanique étant donné le bruit important d'imagerie (environ 2 % de la dynamique des niveaux de gris de l'image). La mesure requiert une texture en niveaux de gris sur les images qui est assurée ici par le dépôt d'un mouchetis par microlithographie [9]. De plus, la connaissance de la microstructure en surface par EBSD permet de réaliser les mesures cinématiques en utilisant un maillage d'éléments finis non-structurés s'appuyant sur les joints de grains ou de macles. Un tel maillage est présenté en Figure 1(a) pour l'une des microstructures étudiées, sur lequel les joints de la microstructure sont tracés en blanc et dont la taille caractéristique des éléments est de 20 pixel (soit 3  $\mu\text{m}$ ). Une incertitude-type de mesure de 0.029 pixel (soit 4.3 nm) est alors obtenue. Le champ de déformation mesuré dans la direction de traction (horizontale) est présenté en Figure 1(b) pour une déformation macroscopique de 5 %. Le champ des résidus en niveaux de gris correspondant présenté en Figure 1(c) indique la qualité de la mesure. On peut observer des zones dans lesquelles les résidus sont plus élevés ce qui correspond à une évolution des niveaux de gris dans certains grains au cours du temps, conséquence probable d'un phénomène de canalisation des électrons [10].

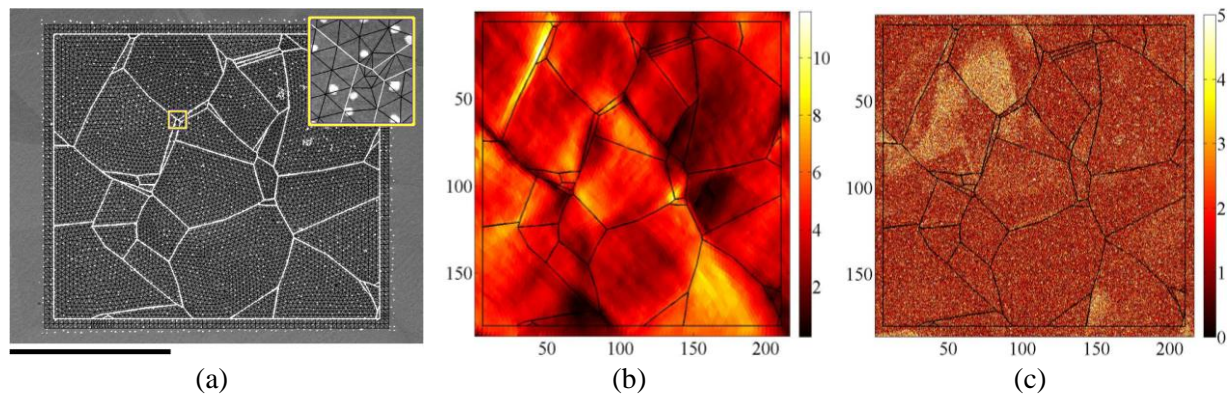


Figure 1 – Maillage non-structuré de la microstructure expérimentale superposé à l'image MEB de la région d'intérêt (a). La barre d'échelle fait 100  $\mu\text{m}$ . Champ de déformation longitudinal (en %) mesuré pour une déformation macroscopique de 5 % (b). Résidus de corrélation en pourcentage de la dynamique de l'image de référence (c). Les axes sont exprimés en micromètres

### 3 Simulation avec un modèle de plasticité cristalline

La modélisation des essais *in-situ* est ensuite mise en œuvre à l'échelle microstructurale en utilisant le code éléments finis Code\_Aster. La loi phénoménologique de plasticité cristalline proposée par Méric et Cailletaud [11] a été choisie dans cette étude. Cette loi de comportement définit pour chaque système de glissement des relations d'écrouissage isotrope, cinématique et d'écoulement viscoplastique. Un premier jeu de paramètres est obtenu en identifiant par homogénéisation les paramètres d'écrouissage isotrope avec le modèle de Berveiller et Zaoui [12], les autres paramètres étant fixés à des valeurs issues de la littérature. Pour modéliser la microstructure expérimentale connue uniquement en surface, le même maillage que celui de la mesure est utilisé pour la simulation de chaque essai de traction, avec comme conditions aux limites les déplacements nodaux mesurés au cours du temps sur les bords du domaine. De plus, l'hypothèse de contraintes planes est adoptée afin de pouvoir construire les tenseurs 3D de contrainte et de déformation requis par la loi de comportement. La Figure 2(a) montre l'écart entre les champs de déplacement mesuré et simulé dans la direction de traction (horizontale) pour une déformation macroscopique de 5 %. Par rapport à l'amplitude des déplacements à ce niveau du chargement, d'environ 10  $\mu\text{m}$ , cet écart est relativement faible, avec un écart type de 0.3  $\mu\text{m}$ . Il est néanmoins important comparé à l'incertitude de mesure (4.3 nm). Sa minimisation tout au long du chargement fera l'objet de la partie suivante en vue d'optimiser les paramètres de la loi de plasticité cristalline. Par ailleurs, la comparaison entre la mesure et la simulation peut être réalisée à l'échelle des systèmes de glissement. Par exemple, en supposant connus les principaux systèmes activés (d'après la simulation) et en négligeant la déformation élastique, il est possible d'inverser la relation entre le tenseur de déformation  $\boldsymbol{\varepsilon}$  et le glissement  $\boldsymbol{\gamma}_s$  sur chacun de ces systèmes  $s$

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}} = \sum_s \dot{\boldsymbol{\gamma}}_s \boldsymbol{\mu}_s \quad (1)$$

où  $\boldsymbol{\mu}_s$  est le tenseur de Schmid. Le champ de glissement principal peut ainsi être évalué expérimentalement. Il est comparé en Figure 2(b) à celui obtenu par la simulation. On observe alors un très bon accord entre les deux champs, ce qui tend à valider les hypothèses de modélisation.

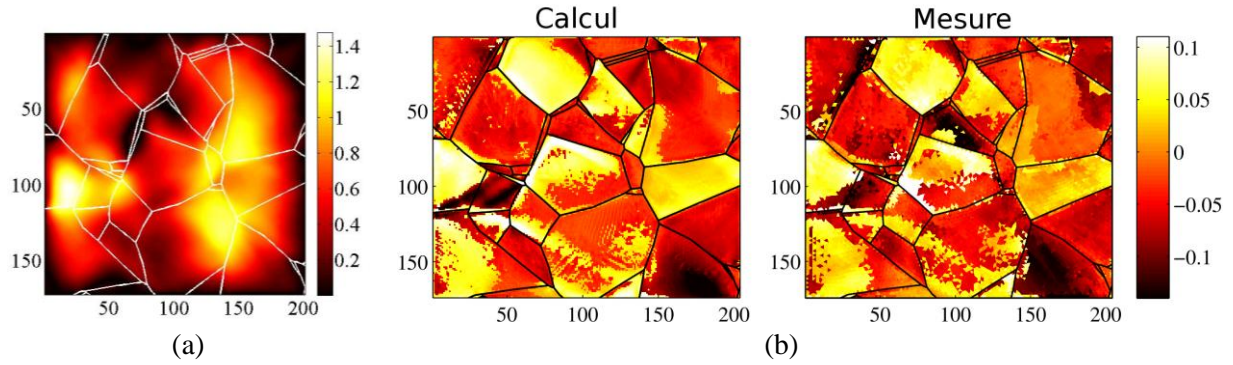


Figure 2 – Différence entre le champ de déplacement longitudinal simulé et mesuré (en  $\mu\text{m}$ ) pour une déformation macroscopique de 5 % (a). Comparaison à ce même pas de temps entre le champ de glissement principal simulé et celui obtenu à partir du champ de déformation mesuré (b). Les axes sont exprimés en micromètres

## 4 Identification des paramètres de loi

### 4.1 Méthode proposée

Une méthode de recalage du modèle par éléments finis (FEMU) pondéré est utilisée dans cette étude pour identifier les paramètres de la loi de plasticité cristalline. Elle est basée sur la minimisation d'une combinaison de deux critères de moindres carrés : 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 fonctionnelle totale à minimiser s'écrit

$$\chi_T^2(\mathbf{p}) = (1-w)\chi_u^2 + w\chi_F^2 \quad (2)$$

où  $\mathbf{p}$  est le jeu de paramètre à identifier et  $w$  un poids à choisir entre 0 et 1 [13]. Avec les expressions de  $\chi_u$  et de  $\chi_F$  la fonctionnelle devient

$$\chi_T^2(\mathbf{p}) = (1-w) \frac{1}{2\eta_f^2 N_{dof} N_t} \sum_t \{\Delta \mathbf{u}_t\}^T [\mathbf{M}] \{\Delta \mathbf{u}_t\} + w \frac{1}{\eta_F^2 N_t} \{\Delta \mathbf{F}\}^T \{\Delta \mathbf{F}\} \quad (3)$$

où  $\{\Delta \mathbf{u}_t\}$  est le vecteur colonne de la différence au pas de temps  $t$  entre les déplacements mesurés et calculés à chaque nœud du maillage,  $\{\Delta \mathbf{F}\}$  le vecteur colonne de la différence à tous les pas de temps entre l'effort expérimental et celui obtenu par un calcul d'homogénéisation.  $N_{dof}$  et  $N_t$  sont respectivement le nombre de degrés de liberté du maillage et le nombre de pas de temps.  $[\mathbf{M}]$  est la matrice de corrélation d'images introduite avec la variance  $\eta_f^2$  du bruit d'acquisition des images MEB de manière à pondérer le critère de moindres carrés étant donné que ces grandeurs sont reliées à la matrice de covariance  $[\mathbf{C}]$  du champ de déplacement mesuré [14]

$$[\mathbf{C}] = 2\eta_f^2 [\mathbf{M}]^{-1} \quad (4)$$

De manière similaire, la variance  $\eta_F^2$  du capteur d'effort est introduite pour normer  $\chi_F$ .

## 4.1 Résultats

Nous présentons dans cette partie les résultats d'identification des paramètres  $r_0$ ,  $q$  et  $b$  de la relation d'écrouissage isotrope de la loi de Méric et Cailletaud

$$r_s = r_0 + q \left( \sum_{r=1}^{12} h_{sr} (1 - e^{-bp_r}) \right) \quad (5)$$

où  $p_r$  est la déformation plastique cumulée du système  $r$  et  $h_{sr}$  sont les coefficients de la matrice d'interaction entre les systèmes de glissement. Les paramètres  $q$  et  $b$  ayant une influence quasi-identique sur les champs de déplacement ou sur la courbe contrainte-déformation macroscopique simulés, nous avons choisi d'identifier  $r_0$  et le produit  $qb$  en fixant la valeur de  $q$ .

La Figure 3(a) donne les valeurs de ces paramètres à convergence de l'identification en fonction de la valeur du poids  $w$  choisie. Cette plage de valeurs est bornée par les extrema obtenus en considérant d'un côté uniquement l'effort macroscopique (pour  $w = 1$ ) et d'un autre côté uniquement les champs de déplacements microscopiques (pour  $w = 0$ ). La Figure 3(b) montre l'évolution avec  $w$  de la courbe contrainte-déformation obtenue à convergence via le modèle d'homogénéisation. On peut noter que le comportement effectif prédit avec  $w = 0.01$  et  $w = 0.001$  n'est plus réaliste. Le résultat obtenu pour  $w = 0.1$  semble être en revanche un bon compromis entre la minimisation de l'écart sur la réponse locale et la conservation d'un comportement effectif réaliste.

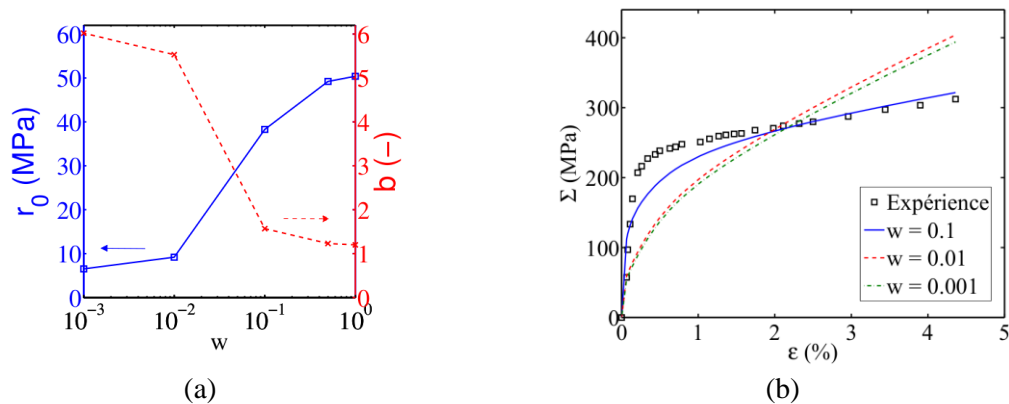


Figure 3 – Valeurs des paramètres  $r_0$  et  $b$  d'écrouissage isotrope identifiées selon le poids  $w$  choisi (a). Courbes contrainte-déformation obtenu par homogénéisation à convergence de l'identification réalisée pour différentes valeurs de  $w$ , comparées à la courbe expérimentale (b)

Cette identification de paramètres a été conduite pour différentes tailles moyennes de grain grâce à plusieurs microstructures expérimentales (Figure 4). Ceci nous a permis d'identifier une loi de Hall-Petch à l'échelle des systèmes de glissement (ce qui est habituellement réalisé à l'échelle macroscopique à partir de la limite d'élasticité), c'est-à-dire une relation affine entre la cission résolue critique initiale  $r_0$  et l'inverse de la racine carrée de la taille moyenne de grain  $d$ . La Figure 5 montre le résultat obtenu à partir des valeurs de  $r_0$  identifiée par homogénéisation pour  $w = 1$  (en bleu) et pour  $w = 0.1$  (en rouge). On peut noter que le choix  $w = 0.1$  conduit à une meilleure identification de la loi de Hall-Petch avec un coefficient de corrélation de 0.99 contre 0.91 lorsque  $w = 1$ . Ce résultat tend à valider le choix  $w = 0.1$  pour l'optimisation des champs de déplacement simulés.

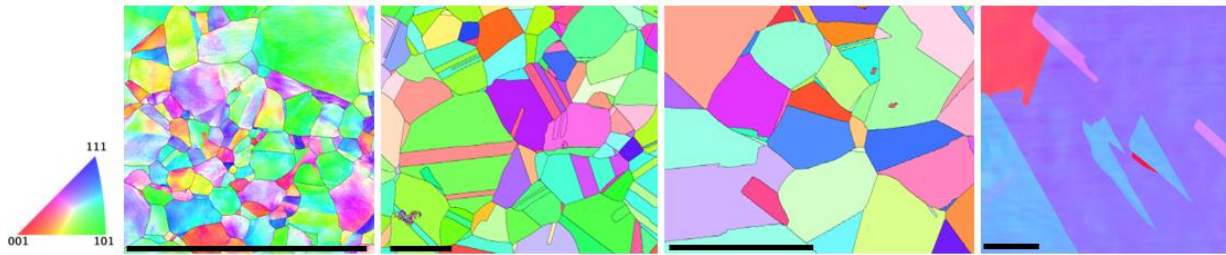


Figure 4 – Figure de pôle inverse et figure des joints de grains des différentes microstructures dans les quatre régions d'intérêt considérées dans cette étude. La barre d'échelle fait 100  $\mu\text{m}$

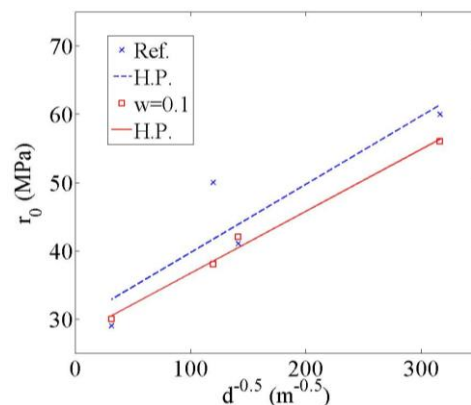


Figure 5 – Identification de la loi Hall-Petch (noté H.P.) à partir des valeurs initiale de  $r_0$  ( $w = 1$ ) et à partir de celles identifiées avec  $w = 0.1$

## 4 Conclusions et perspectives

Cette étude a proposé un couplage entre des mesures de champs à l'échelle microstructurale et des calculs de plasticité cristalline dans le cas d'un acier austénitique 316LN. D'un côté, les mesures cinématiques ont été réalisées au cours d'essais de traction *in-situ* par une méthode globale de corrélation d'images numériques basée sur un maillage non-structuré s'appuyant sur les joints de la microstructure. D'un autre côté, la simulation des essais a été effectuée avec la loi locale de plasticité cristalline initialement proposée par Méric et Cailletaud. La comparaison entre l'expérience et le modèle a été menée en considérant les champs cinématiques mais aussi l'activité des systèmes de glissement. Enfin, une identification de certains paramètres de la loi a été proposée, se basant à la fois sur l'optimisation de la réponse locale en termes de champs de déplacement et sur le comportement effectif prédit par un modèle d'homogénéisation. Le choix d'une pondération particulière entre ces deux échelles a conduit à une bonne identification de la loi de Hall-Petch à l'échelle des systèmes de glissement. L'écart à convergence entre la mesure et la prédiction du modèle restant non négligeable, d'autres lois de comportement pourraient être étudiées par la suite. De plus, il serait intéressant de mettre en œuvre des approches expérimentales permettant de caractériser la vraie microstructure 3D, ce qui était une information clef manquante dans cette étude.

## Références

- [1] S. Leclercq, D. Lidbury, S. Van Dyck, D. Moinereau, A. Alamo, and A. Al Mazouzi, PERFORM 60 – Prediction of the effects of radiation for reactor pressure vessel and in-core materials using multi-scale modelling – 60 years foreseen plant lifetime, *Journal of Nuclear Materials*, 406, 193-203, 2010
- [2] M. Kamaya, and M. Itakura. Simulation for intergranular stress corrosion cracking based on a three-dimensional polycrystalline model, *Engineering Fracture Mechanics*, 76, 386-401, 2009
- [3] A. Musienko, and G. Cailletaud. Simulation of inter- and transgranular crack propagation in polycrystalline aggregates due to stress corrosion cracking, *Acta Materialia*, 57, 3840-3855, 2009
- [4] J. Schwartz, O. Fandeur, and C. Rey. Fatigue crack initiation modeling of 316LN steel based on non local plasticity theory, *Procedia Engineering*, 2, 1353-1362, 2010
- [5] F. Roters, P. Eisenlohr, L. Hantcherli, D.D. Tjahjanto, T.R. Bieler, and D. Raabe, Overview of constitutive laws, kinematics, homogenization and multiscale methods in crystal plasticity finite-element modeling: Theory, experiments, applications, *Acta Materialia*, 58, 1152-1211, 2010
- [6] T. Hoc, J. Crépin, L. Gélébart, and A. Zaoui, A procedure for identifying the plastic behavior of single crystals from the local response of polycrystals, *Acta Materialia*, 51, 5477-5488, 2003
- [7] H. Leclerc, J.-N. Périé, S. Roux, and F. Hild, Integrated digital image correlation for the identification of mechanical properties, *MIRAGE 2009, LNCS*, 5496, 161-171, 2009
- [8] Z. Tomičević, F. Hild, and S. Roux, Mechanics-aided digital image correlation, *Journal of Strain Analysis for Engineering Design*, 48, 330-343, 2013
- [9] A. Guery, F. Latourte, F. Hild, and S. Roux, Characterization of SEM speckle pattern marking and imaging distortion by digital image correlation, *Measurement Science and Technology*, 25, 015401, 2014
- [10] S. Zaeferrer, and N.-N. Elhami, Theory and application of electron channelling contrast imaging under controlled diffraction conditions, *Acta Materialia*, 75, 20-50, 2014
- [11] L. Méric, P. Poubanne, and G. Cailletaud, Single crystal modeling for structural calculations: Part 1 – Model Presentation, *Journal of Engineering Materials and Technology*, 113, 162-170, 1991
- [12] M. Berveiller, and A. Zaoui, An extension of the self-consistent scheme to plastically-flowing polycrystals, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 26, 325-344, 1979
- [13] F. Mathieu, H. Leclerc, F. Hild, and S. Roux, Estimation of elastoplastic parameters via weighted FEMU and integrated-DIC, *Experimental Mechanics*, in press (DOI: 10.1007/s11340-014-9888-9), 2014
- [14] G. Besnard, F. Hild, and S. Roux, “Finite-Element” displacement fields analysis from digital images: Application to Portevin-Le Chatelier bands, *Experimental Mechanics*, 46, 789-803, 2006