

Habilitation à diriger des Recherches

Université de Lille 1
Spécialité :
Sciences Mathématiques

Fiabilité et durée de vie des composants et des structures métalliques

Benoît TANGUY

Soutenue le 15 décembre 2009

Devant le jury composé de :

| | |
|---|------------|
| M ^{me} Suzanne DEGALLAIX-MOREUIL | Président |
| M. Djimédo KONDO | Rapporteur |
| M. Eric MAIRE | Rapporteur |
| M. Thomas PARDOEN | Rapporteur |
| M. Jacques BESSON | Examineur |
| M. Yves BRECHET | Examineur |
| M. Sylvain LECLERCQ | Examineur |
| M. André PINEAU | Examineur |
| M. Robert AINSWORTH | Invité |
| M. Pascal YVON | Invité |

**Commissariat à l'Energie Atomique
Département des Matériaux pour le Nucléaire
Service d'Etudes des Matériaux Irradiés
Laboratoire de Comportement mécanique des Matériaux Irradiés**

Plan

| | | |
|----------|--|----|
| I. | Introduction | 5 |
| I.1. | Environnement scientifique | 5 |
| I.2. | Thématiques de recherche | 7 |
| I.2.1. | Cadre général : l'approche locale de la rupture | 8 |
| I.2.2. | Introduction à la problématique traitée | 10 |
| I.3. | Plan du mémoire | 12 |
| II. | Les matériaux étudiés | 15 |
| III. | L'endommagement et la rupture ductile dans les aciers | 21 |
| III.1. | Introduction | 21 |
| III.2. | Les mécanismes d'endommagement et de rupture ductile | 21 |
| III.2.1. | La germination | 21 |
| III.2.2. | La croissance | 23 |
| III.2.3. | La coalescence | 24 |
| III.3. | Endommagement couplé au comportement | 25 |
| III.3.1. | Introduction | 25 |
| III.3.2. | Le modèle GTN | 26 |
| III.3.3. | Le modèle de Rousselier | 27 |
| III.3.4. | Identification des paramètres des modèles | 28 |
| III.4. | Endommagement ductile et comportement plastique anisotrope | 31 |
| III.5. | Etude de la déchirure ductile sous sollicitation rapide | 32 |
| III.6. | Conclusions | 37 |
| IV. | Rupture par clivage des aciers | 75 |
| IV.1. | Cadre général : modélisation statistique de la rupture fragile | 75 |
| IV.2. | Modélisation physique de la rupture par clivage dans les aciers de structure | 76 |
| IV.2.1. | Mécanismes de clivage dans les aciers de structure | 76 |
| IV.2.2. | Etude des mécanismes de clivage dans le bas de la transition sur les aciers de cuve | 78 |
| IV.3. | Modélisation statistique de la rupture par clivage des aciers bainitiques | 79 |
| IV.3.1. | Identification des paramètres de la distribution de Weibull | 83 |
| IV.3.2. | Les modèles de Beremin et de Weibull sont ils forcément liés ? | 83 |
| IV.3.3. | Vers une description complète des mécanismes dans les modèles | 84 |
| IV.3.4. | Evaluation des modèles dans la transition fragile–ductile par la détermination du critère de rupture | 88 |

| | | |
|---------|---|-----|
| IV.4. | Problématique de la transférabilité des paramètres entre géométries entaillée et fissurée | 94 |
| IV.5. | Conclusions | 97 |
| V. | Transition ductile-fragile | 125 |
| V.1. | Introduction | 125 |
| V.2. | Modélisation de l'essai de résilience et passage résilience/ténacité | 126 |
| V.2.1. | Où l'expérience guide la modélisation | 127 |
| V.2.2. | Prévision de la transition ductile-fragile | 129 |
| V.3. | Discussion sur le clivage dans la transition | 131 |
| V.3.1. | Dépendance en température de l'énergie de surface effective ? | 132 |
| V.3.2. | Evolution de la distribution des défauts critiques avec la température ? | 132 |
| V.3.3. | Modification de la nature de la population des défauts critiques avec la température ? | 134 |
| V.3.4. | Modification de l'étape critique qui contrôle le clivage avec la température ? | 134 |
| V.4. | Etude de l'influence de la fragilisation par l'irradiation sur les courbes de résilience et de ténacité | 139 |
| V.4.1. | Introduction | 139 |
| V.4.2. | Démarche adoptée | 140 |
| V.4.3. | Effet de l'irradiation sur le clivage | 142 |
| V.4.4. | Effet de l'irradiation sur la rupture ductile | 143 |
| VI. | Conclusions - Travaux en cours - Perspectives | 211 |
| VI.1. | Conclusions | 211 |
| VI.2. | Travaux en cours | 212 |
| VI.2.1. | Endommagement et rupture ductile | 213 |
| VI.2.2. | Rupture par clivage | 216 |
| VI.3. | Perspectives | 217 |
| VI.3.1. | Endommagement et rupture ductile | 218 |
| VI.3.2. | Rupture par clivage | 218 |
| VI.3.3. | Comportement des matériaux irradiés | 219 |
| VI.3.4. | Problématique des internes de cuve | 219 |
| VI.3.5. | Conclusions | 220 |

I. Introduction

I.1. Environnement scientifique

Mon travail de doctorat s'est effectué entre octobre 1997 et juillet 2001 au sein du Centre des Matériaux (CdM) de l'Ecole des Mines de Paris sur le thème "Modélisation de l'essai Charpy par l'approche locale de la rupture. Application au cas de l'acier 16MND5 dans le domaine de la transition", travail encadré par A. Pineau et R. Piques.

Mon intégration sur un poste d'ingénieur de recherche au sein l'équipe Mécanique et Matériaux (MM) du CdM de l'ENSM, alors composée de deux groupes dirigés par A. Pineau et R. Piques respectivement, a eu lieu en juillet 2001 quelques jours avant la soutenance de ma thèse qui s'était déroulée au sein de cette même équipe. A. Pineau dirigeait le groupe "Métallurgie Mécanique" (MM) et R. Piques dirigeait le groupe "Comportement des Polymères" (CPO), ces deux groupes développant le même type d'approche pour prédire l'endommagement et la rupture des matériaux métalliques d'une part, et des polymères¹ d'autre part.² La démarche scientifique, suivie par l'ensemble des chercheurs de l'équipe, est fondée sur des essais mécaniques, sur des observations des mécanismes physiques de l'endommagement et de la rupture et sur la modélisation des lois de comportement utilisées dans des calculs par méthode des éléments finis d'éprouvettes de laboratoires confrontés aux expériences avant d'être utilisés pour des calculs de structures industrielles. A mon arrivée au sein de l'équipe MM, j'ai pris la responsabilité d'un sous-ensemble au sein de l'équipe, sur la thématique de la rupture des aciers.

Début 2002, je suis parti comme scientifique invité au Fraunhofer Institut de Freiburg (séjour post-doctoral), dans l'équipe du Dr D. Siegele, où j'ai pu développer mon expérience sur les nouvelles normes de nature probabiliste de la mécanique de la rupture³, confronter ces méthodes à la méthodologie utilisée pendant ma thèse, et travailler sur les essais dynamiques de ténacité avec le Dr W. Böhme, spécialiste reconnu des essais à grandes vitesses. Puis je suis revenu au Centre des Matériaux, au sein de l'équipe Mécanique et Matériaux, en Octobre 2002 sur un poste de Chargé de Recherche de l'Ecole des Mines de Paris. Mon retour a coïncidé avec la décision de R. Piques de quitter l'équipe MM. En plus de l'animation d'un sous-ensemble de personnes au sein de l'équipe, mes goûts pour l'expérimentation m'ont alors amené à prendre la responsabilité du pôle technique chargé du fonctionnement et du développement des dispositifs d'essais mécaniques associés à des machines servo-hydrauliques, avec comme premier objectif la définition et le développement d'une plate-forme d'essais à grandes vitesses de sollicitation. Cet équipement a été adossé au développement d'une thématique de recherche sur les effets de la vitesse de déformation sur le comportement et la rupture des matériaux étudiés au sein du Centre des Matériaux. Sa conception et sa réalisation visaient la polyvalence. Il est actuellement utilisé par plusieurs équipes de recherche menant des études sur les matériaux métalliques, les composites et les polymères.

En parallèle, j'ai poursuivi mon implication dans les travaux de l'équipe sur l'endommagement et la rupture des matériaux métalliques, d'une part en me basant sur mon expertise dans les mécanismes de rupture des aciers de cuve acquise pendant ma thèse et mon séjour post-doctoral, et d'autre part sur le développement de simulations numériques d'essais complexes. Ces derniers travaux ont été réalisés en

¹La terminologie "Polymères" est ici employée au sens large anglosaxon et regroupe les familles élastomère et polymère.

²A cette époque, malgré son appellation, le groupe CPO développait également des travaux sur l'endommagement à haute température des matériaux métalliques et sur la modélisation de leur comportement élastoviscoplatique.

³Ces méthodes connues désormais sous la dénomination "Master Curve" sont décrites dans la norme ASTM E1921.

collaboration étroite avec J. Besson, de l'équipe Cocas (Comportement et Calcul des Structures), équipe responsable du développement du code de calcul ZéBulon.

Une des vocations des équipes de recherche du Centre des Matériaux de l'Ecole des Mines de Paris est de mener une recherche appliquée en liaison avec l'industrie, vers laquelle le chercheur doit s'appliquer à diffuser ses résultats et ses méthodologies. Toutes les études que j'ai développées au Centre des Matériaux ont donc été adossées à un contrat en partenariat industriel. Dans le cadre de mes missions au CdM, j'ai participé à des actions de recherche en collaboration avec des partenaires industriels tels que EDF, Renault, IFP, Turboméca, Arcelor, Alcan..., ainsi qu'au montage de projets ANR (projet ALICANDTE accepté en 2007). Le soucis de transférabilité vers l'industrie des méthodologies utilisées m'a conduit à participer activement à des groupes de normalisation (TC8 "Numerical Methods" de l'ESIS) et à m'impliquer dans l'évaluation de propositions de normes en relation avec nos travaux.

La complexité des problématiques industrielles impose de mettre en oeuvre plusieurs types de compétences pour y répondre : j'ai été amené à collaborer avec plusieurs chercheurs du Centre des Matériaux pour codiriger des études (A. Pineau, J. Besson, A.F. Gourgues-Lorenzon, L. Nazé, S. Forest) et à développer des collaborations avec des chercheurs d'autres laboratoires de recherche : D. Rittel (Université du Technion, Israel) lors de son séjour au CDM, E. Maire (Insa Lyon), M. Benhamour (Faculté des sciences de l'ingénieur de Tlemcen, Algérie). J'ai également été amené à cette époque, de part mes travaux de recherche, à cotoyer les équipes de recherche du Commissariat à l'Energie Atomique, qui développaient des approches scientifiques similaires pour répondre aux nombreux défis rencontrés dans le domaine des matériaux métalliques utilisés dans l'industrie électronucléaire. Par ailleurs, mon soucis de valider les outils utilisés, tant expérimentaux que numériques, m'ont amené à participer activement à des *round robin* numériques : Groupe Charpy de la SF2M, groupe TC8 de l'ESIS, et à des benchmark expérimentaux (benchmark sur les observations fractographiques).

Le Centre des Matériaux a également une mission d'enseignement. J'ai donc naturellement participé à la formation du Mastère COMADIS, à la formation doctorale de l'INSTN et à des actions de formation continue auxquelles je participe toujours. J'ai notamment été amené, à la création du pôle de compétitivité ASTECH (Aéronautique et aérospatiale en Ile de France), à diriger un groupe de travail sur la formation et la recherche au sein de ce pôle. J'ai par ailleurs, en collaboration avec A. Pineau, mis en place et enseigné une formation continue sur la Mécanique de la Rupture destinée aux ingénieurs de l'administration chargés du contrôle des centrales nucléaires françaises.

Fort de la méthodologie développée au cours de mes travaux au Centre des Matériaux, notamment sur la prédiction de la fragilisation par irradiation de la ténacité et de la résilience des aciers de cuve, et intéressé par les nombreux défis à relever dans le domaine des matériaux du nucléaire, j'ai été amené à rejoindre le Département des Matériaux pour le Nucléaire (DMN) au CEA en novembre 2007, sur un poste d'ingénieur de recherche. Mon intégration s'est faite dans le Service d'Etudes des Matériaux Irradiés (SEMI) au sein du Laboratoire de Comportement mécanique des Matériaux Irradiés (LCMI), qui a en charge le développement et la réalisation de dispositifs d'essais mécaniques et la réalisation d'essais sur les matériaux irradiés. Complémentaire à la réalisation d'essais mécaniques, une des missions du

LCMI est de proposer et d'identifier des lois de comportement pour les matériaux irradiés, pour la simulation de structures en conditions de service. Au sein du SEMI, je suis en charge des projets en relation avec la thématique de la fragilisation par irradiation des aciers de cuve et de ceux en relation avec la thématique de la corrosion sous contrainte assistée par l'irradiation des aciers austénitiques inoxydables d'internes de cuve. Le rôle du responsable d'actions au sein du DMN est de construire et de proposer des projets susceptibles de répondre aux besoins propres du CEA et à ceux des constructeurs et exploitants des systèmes électronucléaires actuels et futurs. Ma mission actuelle consiste à proposer et à conduire des projets susceptibles d'aider les constructeurs et exploitants à anticiper le vieillissement par irradiation des matériaux des centrales de deuxième et troisième générations et à justifier leur intégrité dans le cadre d'une prolongation de la durée de fonctionnement. La construction, la réalisation de ces projets et l'interprétation des résultats qui en sont issus sont adossées au développement en interne d'une expertise scientifique. Je travaille donc en collaboration avec les différents laboratoires du DMN, les laboratoires d'autres départements du CEA, des laboratoires universitaires nationaux et internationaux et des organismes de R&D internationaux. Pratiquement, je développe une partie de cette expertise scientifique à partir de l'encadrement de stages et de thèses qui s'inscrivent dans les thématiques dont je suis en charge.

I.2. Thématiques de recherche

Mes travaux développés au Centre des Matériaux de l'Ecole des Mines de Paris puis au Département des Matériaux pour le Nucléaire (DMN) du CEA Saclay ont pour objectif de prévoir l'endommagement et la rupture des structures à partir de la connaissance des mécanismes physiques d'endommagement des matériaux. Mon projet scientifique est donc axé d'une part sur le développement d'une modélisation physique du comportement et de la rupture des matériaux étudiés, et d'autre part sur le développement d'expérimentations permettant d'enrichir l'identification des modèles proposés sur des bases physiques. Au cours de mes travaux, j'ai été amené à m'intéresser à deux grandes familles de matériaux métalliques : la famille des cubiques centrés : aciers bainitiques de cuve de REP, aciers ferrito-perlitiques pour vilebrequin, aciers ferrito-bainitiques pour les pipelines, aciers bainitique et martensitique de structure, aciers pour tôle automobile (doux et à très haute limite d'élasticité (THLE)); et la famille des cubiques faces centrés : alliages aluminium et hypersilicés pour applications F1, alliage aluminium-lithium pour application aéronautique, aciers inoxydables austénitiques (AISI 301, 201, 304, 316) pour les industries automobile et électronucléaire, alliages à base Cobalt (UDIMET 720), alliages à durcissement structural. J'ai alors étudié le développement de l'endommagement sous différents types de sollicitations (monotone quasi-statique, monotone quasi-statique rapide⁴, dynamique et cyclique).

Ces études m'ont permis de développer une bonne connaissance des différentes microstructures en relation avec les propriétés mécaniques des matériaux. Bien entendu mon niveau de connaissance de ces matériaux et de leur endommagement est inégal ; je développerai ici les études sur les matériaux dont ma compréhension est la plus aboutie.

Les travaux réalisés concernent principalement trois thématiques :

1. L'endommagement et la rupture dans les aciers. Dans cette thématique, nos études, réalisées

⁴Cette dénomination est utilisée pour des essais avec une sollicitation rapide mais sans effets inertiels contrairement aux essais dynamiques.

dans le cadre de l'approche locale de la rupture, ont été consacrées aux mécanismes de rupture rencontrés en fonction de la température lors de la construction des courbes de résilience et de ténacité :

- la rupture ductile,
- la rupture fragile par clivage,
- la transition ductile–fragile.

Les travaux réalisés ont permis de proposer une modélisation de la courbe de résilience et, pour l'acier de cuve, la prévision de la ténacité à partir des essais de résilience (passage résilience–ténacité). On ne traite ici, pour le clivage, que de la rupture transgranulaire et pas de la rupture intergranulaire liée aux problèmes de ségrégation d'éléments aux joints de grains, tels que le phosphore.

2. L'effet de la vitesse de déformation sur le comportement, la rupture et les mécanismes de rupture dans les alliages métalliques. Dans le cadre de cette thématique, j'ai étudié la transformation martensitique dans les aciers inoxydables austénitiques instables (Thèse de S. Nanga), et les instabilités dues à la localisation de la déformation plastique, notamment l'effet Portevin–Le Chatelier, dans un alliage à base Cobalt (Thèse M. Mazière).
3. L'effet de l'environnement et de l'irradiation sur la dégradation des propriétés de comportement et à rupture des aciers.

Par souci de concision et de clarté, ce mémoire présente les travaux réalisés dans la première et la troisième thématique. Sa construction est articulée autour des travaux de recherche menés sur la modélisation de la courbe de résilience et sur le passage résilience-ténacité. Les travaux réalisés dans la deuxième thématique, qui sont moins finalisés à ce jour et devront être poursuivis plus avant, ne sont pas détaillés dans ce mémoire. Une partie de mes travaux actuels s'inscrivent néanmoins dans la continuité des deux thèses encadrées dans cette thématique. Les résultats obtenus dans la thèse de S. Nanga (Nanga, 2008), que j'ai co-encadrée avec A. Pineau, sur les mécanismes de plasticité des aciers inoxydables austénitiques sont utilisés dans les travaux que je développe actuellement dans le cadre de la thèse de S. Cissé sur l'effet de la localisation de la déformation plastique sur la corrosion sous contraintes des aciers inoxydables austénitiques irradiés. Par ailleurs, les résultats de la thèse de M. Mazière (Mazière, 2007) pourraient être utilisés dans le cadre de la problématique des vieillissement statique et dynamique des aciers de cuve, notamment pour étudier les effets de la localisation de la déformation plastique sur l'amorçage et résistance à la propagation de la déchirure ductile.

Un schéma du périmètre de mes champs d'activités scientifiques avec les différentes études est donné sur la figure 1. Les travaux en cours y sont indiqués en couleur.

I.2.1. Cadre général : l'approche locale de la rupture

Dans le monde industriel, les structures dont on souhaite assurer l'intégrité sont gérées par le concept de la tolérance au dommage. Dans le cas de structures fissurées, la justification de l'intégrité des structures est aujourd'hui couramment basée sur l'approche globale de la rupture. Des grandeurs comme la ténacité

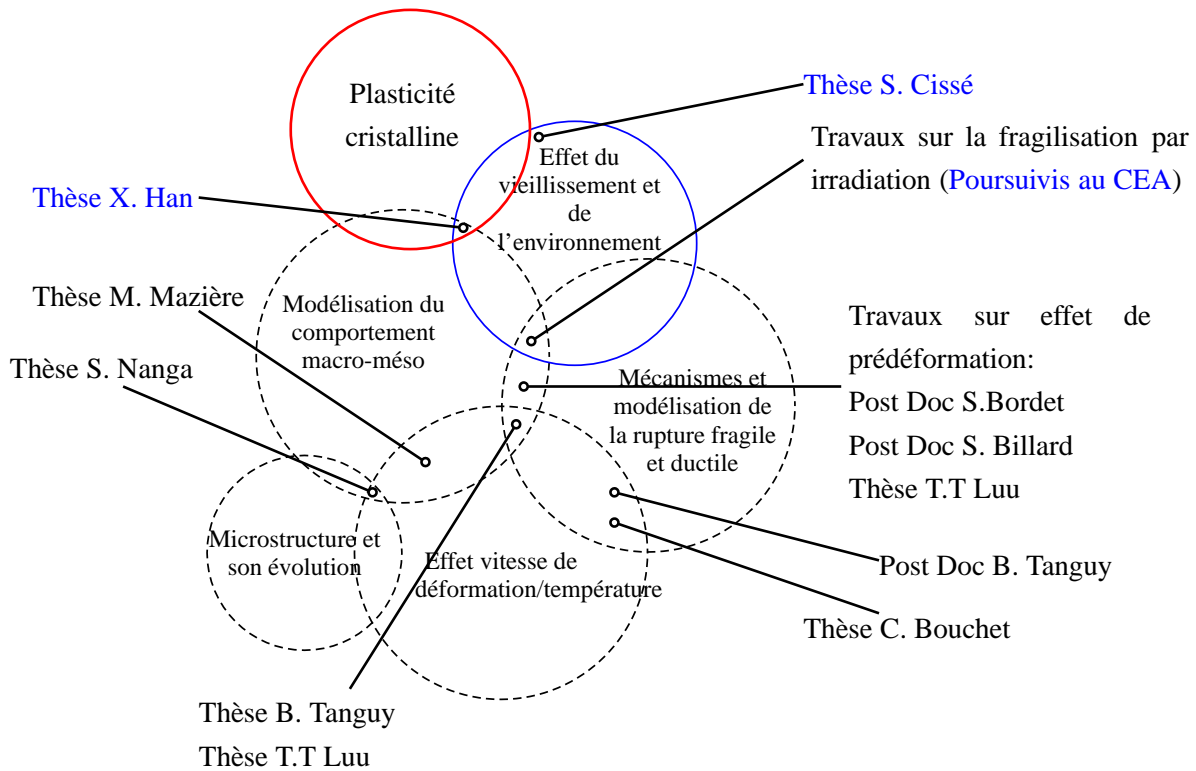


Figure 1: Domaines scientifiques d'études et travaux correspondants (les nouvelles études sont illustrées en couleur).

(K_{Ic}) ou les courbes de résistance à la déchirure ductile ($J - \Delta a$) sont utilisées pour évaluer la nocivité d'un défaut ou son développement potentiel lorsqu'il est soumis à un chargement monotone. Cependant cette approche est mise en défaut dans certains cas (préchargement, chargement anisotherme) et de plus, les grandeurs identifiées sur les éprouvettes de laboratoire sont parfois difficilement transférables aux structures étudiées.

Dans les industries électronucléaire, métallurgique et du transport des énergies fossiles (gaz et pétrole), l'essai de ténacité n'est pourtant pas l'essai de référence. Historiquement, on utilise un essai technologique, l'essai Charpy, qui fournit l'énergie consommée pour déformer et rompre une éprouvette pour un mode de rupture donné. Cet essai permet également de décrire l'évolution du mode de rupture avec la température. Les utilisations de l'essai Charpy sont très variées : chez les acieristes, il est utilisé pour qualifier chaque tôle produite ; dans l'industrie du gaz, il est utilisé pour qualifier la résistance à la propagation dynamique d'une déchirure ductile lors de l'éclatement d'un tube de pipeline ; dans l'industrie électronucléaire le programme de surveillance de la fragilisation des cuves de REP est basé sur la courbe de résilience. Pour donner une idée de l'importance de cet essai, environ 16500 essais Charpy sur aciers de cuve irradiés ont été réalisés à ce jour dans le programme de surveillance des centrales nucléaires françaises, 450000 essais Charpy par an sont réalisés dans les usines de l'acieriste Dillinger-Hütte.

Des corrélations empiriques entre résilience et ténacité (Barsom and Rolfe, 1970; Marandet and Sanz, 1976; Wallin, 1989), entre résilience et contrainte circonférentielle maximale admissible dans un

tube (Maxey, 1981), ont été proposées. Comme tout modèle empirique, leurs applications sont limitées au domaine des conditions d'établissement et pour des matériaux identiques à ceux pour lesquels elles ont été déterminées.

L'approche locale de la rupture (ALR), que j'ai utilisée et utilise dans mes travaux, permet d'envisager de répondre à des problématiques telles que le passage résilience-ténacité. Cette approche a été développée dans les années 80 au Centre des Matériaux, elle est aujourd'hui communément utilisée dans les centres de recherche industriels. Ces travaux ont débouché sur un projet de norme ISO (ISO-CD-27306, 2006), et les concepts de l'approche locale de la rupture sont largement utilisés dans le code R6 en Grande-Bretagne pour la fiabilité des structures (R6-procedure, 2000). Aujourd'hui ce type d'approche est mis en oeuvre comme support aux analyses où l'approche globale est utilisée, notamment pour modéliser plus finement les mécanismes mis en jeu et évaluer au mieux les marges, et d'autre part comme outil d'interprétation de cas où l'approche globale est mise en défaut.

L'approche locale de la rupture s'organise autour de trois grands axes : expérimentation, modélisation et simulation (figure 2).

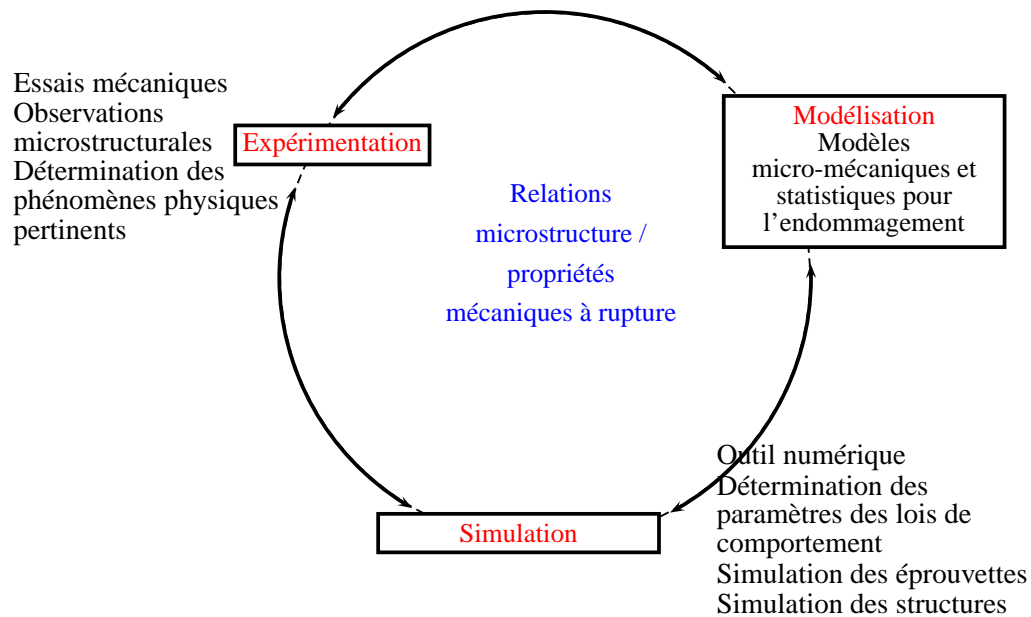


Figure 2: Mise en oeuvre de l'approche locale de la rupture.

Elle s'appuie d'une part sur l'utilisation de modèles physiques des mécanismes de rupture, et d'autre part sur l'analyse détaillée des champs de contraintes, déformations et endommagement dans les zones fortement sollicitées des pièces de structure (pointe de fissure, entaille...), ces champs étant obtenus grâce à des calculs par éléments finis.

I.2.2. Introduction à la problématique traitée

L'essai Charpy est un essai technologique développé en France en 1901 par G. Charpy (fig. 3a) pour permettre de caractériser la fragilité des métaux. Le centenaire de l'essai Charpy a été célébré à la conférence CCC2001 (Charpy Centenary Conference) organisée à l'issue de mes travaux de thèse.

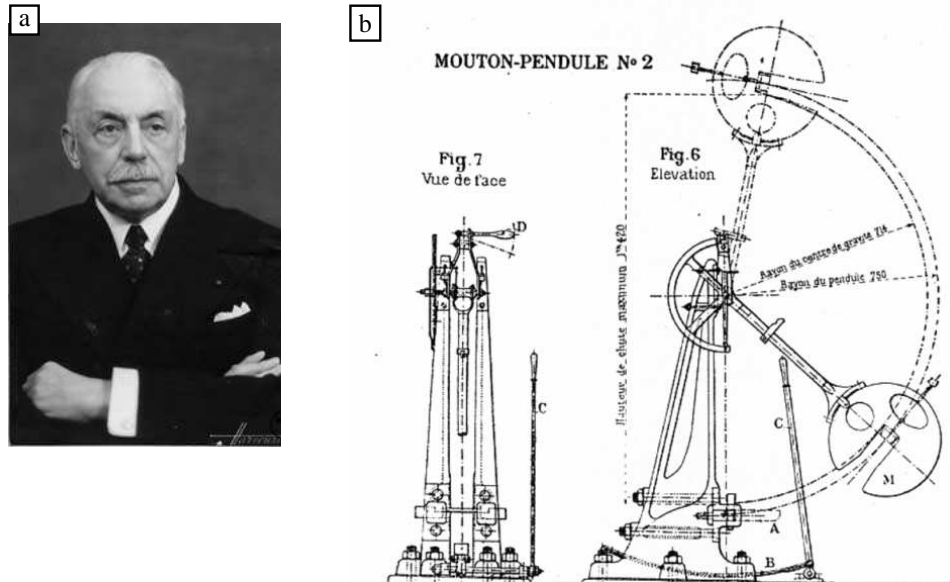


Figure 3: *Essai Charpy*. a) *Portrait de Georges Charpy*, b) *Mouton pendule Charpy de 1904, d'une puissance de 30kgm*.

Cet essai met en oeuvre un mouton-pendule (fig. 3b) qui sollicite par choc un barreau entaillé afin de provoquer sa rupture. On accède à l'énergie dépensée lors pour la rupture de l'éprouvette par un simple calcul d'énergie potentielle. L'énergie dépensée pour la rupture de l'éprouvette est donnée par l'expression (1). Pour les aciers, l'énergie dépensée lors de l'envol des deux moitiés de l'éprouvette est négligeable ce qui n'est pas le cas pour tous les matériaux. Les essais sont effectués en balayant une plage de températures ; on trace alors l'évolution de la résilience en fonction de la température (fig. 4). Lorsqu'on augmente la température, certains métaux présentent une transition dans leur comportement vis à vis de la rupture, passant d'une rupture fragile (faibles énergies) à une rupture ductile (fortes énergies). La plage de températures qui correspond à la zone intermédiaire entre ces deux types de rupture est appelée la **zone de transition ductile-fragile**

$$E_T = P_M \times h_i - P_M \times h_f - E_{frot} - E_{appuis} - E_{cin} \quad (1)$$

$$\text{avec } \left\{ \begin{array}{ll} h_i & \text{hauteur initiale du marteau, } v_i = 0 \text{ ms}^{-1} \\ h_f & \text{hauteur finale du marteau, } v_f = 0 \text{ ms}^{-1} \\ E_{frot} & \text{énergie absorbée par le frottement du pendule} \\ E_{appuis} & \text{énergie absorbée par la déformation des appuis} \\ E_{cin} & \text{énergie cinétique absorbée par l'éprouvette} \\ P_M & \text{poids (marteau + bras)} \end{array} \right.$$

A partir d'essais instrumentés, où l'on enregistre l'évolution de la charge (P) appliquée à l'éprouvette en fonction de sa déflexion (δ), on décompose l'énergie totale consommée au cours de l'essai (obtenue par intégration de l'aire sous la courbe (P, δ)) E_T comme suit (Kobayashi et al., 1967) :

$$E_T = E_i + E_p = E_i + E_c + E_f + E_s \sim E_i + E_f + E_s$$

$$\text{avec } \left\{ \begin{array}{l} E_i \text{ énergie d'amorçage} \\ E_p \text{ énergie de propagation} \\ E_c \text{ énergie absorbée pour la rupture par clivage} \\ E_f \text{ énergie absorbée pour la rupture ductile} \\ E_s \text{ énergie absorbée par les lèvres de cisaillement} \end{array} \right.$$

Pratiquement, pour ce type d'essai, l'énergie nécessaire à l'amorçage (déformation plastique de l'éprouvette), est importante devant celle nécessaire à la rupture. En effet, la particularité de l'éprouvette Charpy est qu'elle engendre la succession de deux transitions pour arriver à la rupture ductile lorsqu'on parcourt l'axe des températures de gauche à droite.

La première transition est la **transition de plasticité**, lorsqu'on passe d'une plasticité confinée (plateau bas) à une plasticité étendue (bas de la transition). La transition de plasticité, et notamment la modification des champs mécaniques locaux qui en résulte, a fait l'objet de nombreuses études dans les années 50 et 60 (voir par ex. (Green and Hundy, 1956; Alexander and Komoly, 1962; Wilshaw et al., 1968)). Contrairement à une éprouvette fissurée, où les champs de contraintes en pointe de fissure sont asymptotiques, le maximum de la contrainte d'ouverture augmente avec la taille de la zone plastique dans le cas de l'éprouvette entaillée. L'utilisation des éléments finis permet de décrire cette première transition du point de vue des champs mécaniques, moyennant l'utilisation d'une loi de comportement élasto(visco)plastique appropriée pour décrire la réponse du matériau aux sollicitations appliquées.

La deuxième transition est la **transition ductile-fragile**, c'est à dire le déclenchement du clivage après un amorçage et une propagation de la déchirure ductile. Lorsqu'une propagation ductile précède la rupture finale par clivage, la description des champs mécaniques locaux homogènes est basée sur des modèles à bases micromécaniques (modèle de Gurson et évolutions) ou thermodynamiques (modèle de Rousselier) existants. Au cours des travaux que j'ai développés, nous avons montré, pour ces modèles, l'intérêt d'introduire une description appropriée du comportement du matériau afin de décrire plus précisément le développement de la déchirure ductile.

Par ailleurs, au cours de mes travaux, je me suis intéressé aux conséquences d'une plasticité importante⁵ sur les mécanismes physiques du clivage dans les aciers bainitiques.

Le succès de la modélisation de l'essai Charpy repose donc sur :

- une description des champs mécaniques locaux intégrant la description de la propagation de la déchirure ductile, et les effets de la vitesse de sollicitation et des échauffements locaux sur le comportement et sur l'endommagement,
- une modélisation de la rupture par clivage basée sur l'étude des effets de la plasticité couplés à ceux de la température sur les mécanismes physiques de la rupture par clivage.

I.3. Plan du mémoire

Le chapitre II de ce mémoire présente l'essentiel des matériaux métalliques qui ont été étudiés dans les travaux présentés⁶ par la suite. Dans notre démarche, l'étude de la microstructure est une étape

⁵On notera l'utilisation de la terminologie "ductile-cleavage region" dans les années 60 (Lindley, 1965) pour décrire le déclenchement du clivage après une déformation plastique macroscopique.

⁶Les résultats du Post-doc de S. Billard (Billard et al., 2007), qui s'inscrivent dans la thématique du rôle des inclusions

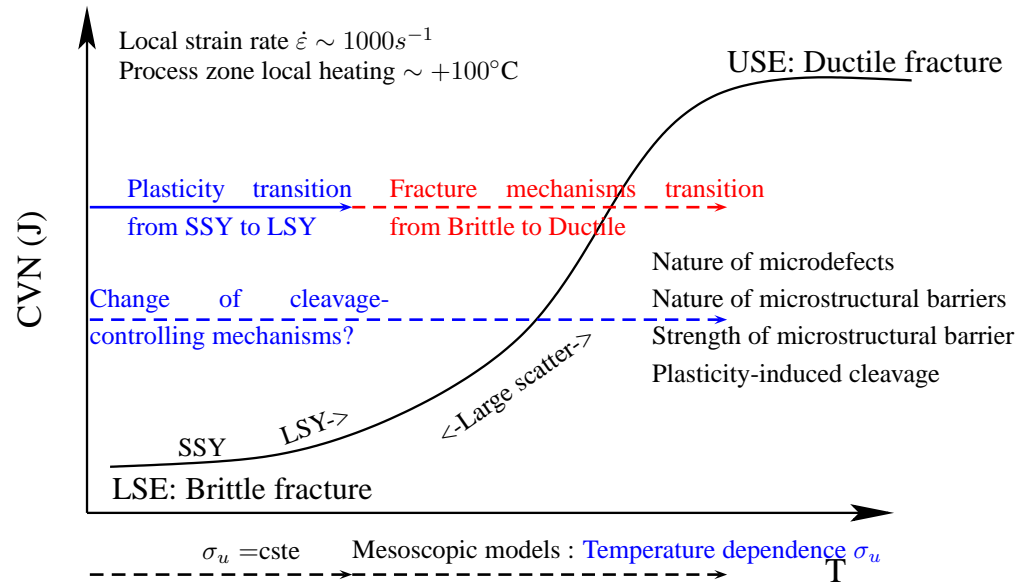


Figure 4: Illustration des différentes problématiques liées à la modélisation de la courbe de résilience. USE : Upper Shelf Energy, LSE : Lower Shelf Energy, SSY : Small Scale Yielding, LSY : Large Scale Yielding.

primordiale, car elle permet de mieux appréhender les mécanismes de rupture.

Le chapitre III du mémoire traite de la description de l'endommagement ductile, particulièrement dans les structures soumises à des fortes vitesses de sollicitation. Nous décrivons l'endommagement ductile dans les aciers de cuve et dans les aciers à haute résistance pour gazoducs, ces derniers présentant une anisotropie de comportement qu'il convient de coupler à l'endommagement ductile. Ces modèles couplés possèdent de nombreux paramètres, une stratégie d'identification est nécessaire. Notre démarche, basée sur les observations métallurgiques et sur la confrontation aux essais mécaniques, est présentée.

Le chapitre IV traite de la description du clivage dans les aciers bainitiques par l'approche locale de la rupture. Les mécanismes, la nature statistique de la rupture par clivage et les modèles correspondants y sont présentés. Une modélisation plus complète des mécanismes physiques du clivage par la description de la phase de germination des microfissures dans les particules de seconde phase est réalisée (Post-doc de S. Bordet) dans le cadre particulier de l'effet d'un préchargement à chaud (WPS) sur la ténacité à basses températures. La nécessité d'introduire une dépendance phénoménologique en température dans la modélisation du clivage pour décrire la remontée marquée de la ténacité et le haut de la transition nous a emmenés à l'étude des populations de défauts et de leur évolution en fonction du développement de la plasticité et de la température, en fonction du type d'éprouvette utilisé (Thèse C. Bouchet). La méthodologie de détermination des paramètres des modèles de clivage est basée sur l'étude des mécanismes de clivage en fonction de la température, sur des géométries entaillées et fissurées.

Dans le chapitre V, nous proposons une modélisation de l'essai Charpy et du passage résilience-ténacité

dans la transition ductile-fragile en ténacité des aciers, ont été classés confidentiels par le partenaire industriel, ils ne seront pas décrits en détail dans ce mémoire.

dans la transition ductile–fragile pour les aciers bainitiques. La méthodologie développée est ensuite utilisée pour interpréter des essais de résilience et de ténacité sur matériau irradié.

Le dernier chapitre est consacré aux conclusions sur les travaux réalisés, à la description des travaux en cours et aux perspectives d'études au sein du Département des Matériaux pour le Nucléaire. Ayant en charge des projets sur la fragilisation par l'irradiation des aciers de cuve, et notamment au delà des 40 ans de durée de fonctionnement des centrales nucléaires, une partie des travaux en cours concernent naturellement l'amélioration de la modélisation de l'endommagement et de la rupture de l'acier de cuve. Deux axes sont déjà identifiés : les trajets de chargement qui ne peuvent pas être décrits par l'approche globale de la rupture (WPS), et la prévision de la ténacité à partir d'éprouvettes miniatures propres aux essais mécaniques sur matériaux irradiés. Parallèlement, une nouvelle thématique a été initiée sur la modélisation des effets d'irradiation sur le comportement et la rupture des internes de cuve. Les études débutées dans ce cadre sont présentées. Un premier axe (Thèse de S. Cissé) est l'étude des effets de la localisation plastique sur la sensibilité à la corrosion sous contrainte des aciers inoxydables austénitiques. Un deuxième axe concerne la modélisation de l'évolution du comportement mécanique avec le développement du gonflement dans les internes de cuve (Thèse de X. Han). Cette étude est menée à l'échelle du cristal et s'appuie sur la description de la plasticité cristalline des aciers inoxydables austénitiques irradiés.

Dans le manuscrit, les références des travaux auxquels j'ai participé activement sont indiquées par la présence d'un astérisque ().*

II. Les matériaux étudiés

Les études que nous avons menées visent à modéliser l'endommagement et la rupture. Il nous a semblé indispensable de décrire au préalable les aciers utilisés et les différentes échelles de leurs hétérogénéités microstructurales. Les études mises en avant ici ont été réalisées sur cinq types d'aciers bainitiques pour cuve de réacteur REP, un acier 16MND5 provenant d'une débouchure de virole, un acier 16MND5 provenant d'un pied de virole, un acier 22NiMoCr37 provenant d'une virole et deux aciers 18MND5 provenant de tôles épaisses, dont l'élaboration est réalisée par aciérie électrique, et sur un acier ferrito-bainitique X100, élaboré par aciérie à oxygène, pour tubes de gazoduc dont les plaques originelles sont réalisées par TMCP (Thermo Mechanical Controlled Process). Les compositions chimiques de ces six aciers sont reportées dans le tableau 1. On notera ici les très basses teneurs en soufre et phosphore des aciers de cuve 1, 2 et 3, la présence de titane dans les aciers 2, 3 et X100, les teneurs élevées en phosphore et cuivre de l'acier 4 et la très faible teneur en carbone de l'acier X100. L'élaboration de ces deux familles d'aciers est très différente : on manipule des pièces forgées d'environ 125 tonnes pour l'acier de cuve, avec des vitesses de refroidissement de l'ordre de $0.1^{\circ}\text{C}/\text{s}$, alors que l'on maîtrise parfaitement les vitesses de laminage et les températures de trempe pour l'acier X100, afin d'obtenir une microstructure très fine.

| Ref | Nuance | Orig. | C | S | P | Si | Mn | Ni | Cr | Mo | Cu | Co | V | Al | Ti |
|-----|------------|------------|-------|--------------|-----------|-------|------|-------|------|-------|-------|-------|-------------|-------|-------|
| 1 | 16MND5 | Virole | 0.163 | 0.004 | 0.008 | 0.225 | 1.33 | 0.765 | 0.22 | 0.515 | 0.07 | 0.017 | ≤ 0.01 | ND | ND |
| 2 | 16MND5 | Débouchure | 0.16 | 0.004 | < 0.010 | 0.23 | 1.32 | 0.72 | 0.23 | 0.49 | 0.07 | 0.01 | 0.005 | ND | ND |
| 3 | 18MND5 | Plaque | 0.19 | ≤ 0.001 | 0.004 | 0.23 | 1.5 | 0.66 | 0.17 | 0.485 | 0.084 | ND | 0.004 | 0.011 | 0.006 |
| 4 | 18MND5 | Plaque | 0.18 | 0.004 | 0.017 | 0.24 | 1.42 | 0.84 | 0.12 | 0.51 | 0.14 | ND | 0.002 | 0.014 | ND |
| 5 | 22NiMoCr37 | Virole | 0.22 | 0.007 | 0.007 | 0.19 | 0.89 | 0.87 | 0.4 | 0.55 | 0.04 | 0.011 | ≤ 0.01 | 0.019 | ND |
| 6 | X100 | Tube | 0.063 | 0.0006 | 0.013 | 0.25 | 1.8 | X | X | X | 0.02 | / | X | 0.029 | 0.018 |

Tableau 1: Compositions chimiques des aciers étudiés (pds%). (ND : non déterminé). Dans le texte, la terminologie 16MND5(i) sera utilisée pour la référence i de la nuance 16MND5.

Les différentes microstructures représentatives sont illustrées sur les figures 6 (microscopie optique) et 7 (microscopie électronique à balayage). Pour ce type de microstructure, le grain morphologique observé après attaque ne correspond pas au grain cristallographique "vu" par une fissure. Le paquet bainitique cristallographique est défini comme un volume cristallin qui diffère de son entourage par une désorientation cristallographique supérieure à une valeur critique. Cette valeur est identifiée autour de 55° sur des aciers bainitiques pour structures off-shore (Lambert-Perlade, 2001). Pour l'acier 16MND5(1), les orientations cristallographiques des paquets bainitiques ont été caractérisées par EBSD (Electron Back-Scatter Diffraction) (Tanguy, 2001)*. A partir de cette analyse, le diamètre moyen du paquet bainitique, de morphologie assez globulaire est identifié à $7.5\mu\text{m}$. La figure 5 montre que pour cet acier, l'histogramme des angles de désorientations est assez plat et que les joints en relation de macle ne sont pas majoritaires, contrairement à la microstructure bainite étudiée par (Lambert-Perlade, 2001).

De façon générale, la microstructure bainitique des aciers de cuve présente plusieurs échelles microstructurales : l'ancien grain austénitique γ , une sous-structure en paquets de lattes et des carbures inter-/ et intragranulaires qui peuvent être regroupés en colonies (amas), de différentes natures : de type M_2C (riche en molybdène) ou M_3C (cémentite). Les carbures présentent une distribution de taille et des morphologies différentes (globulaire et/ou en aiguille). Les observations montrent que la

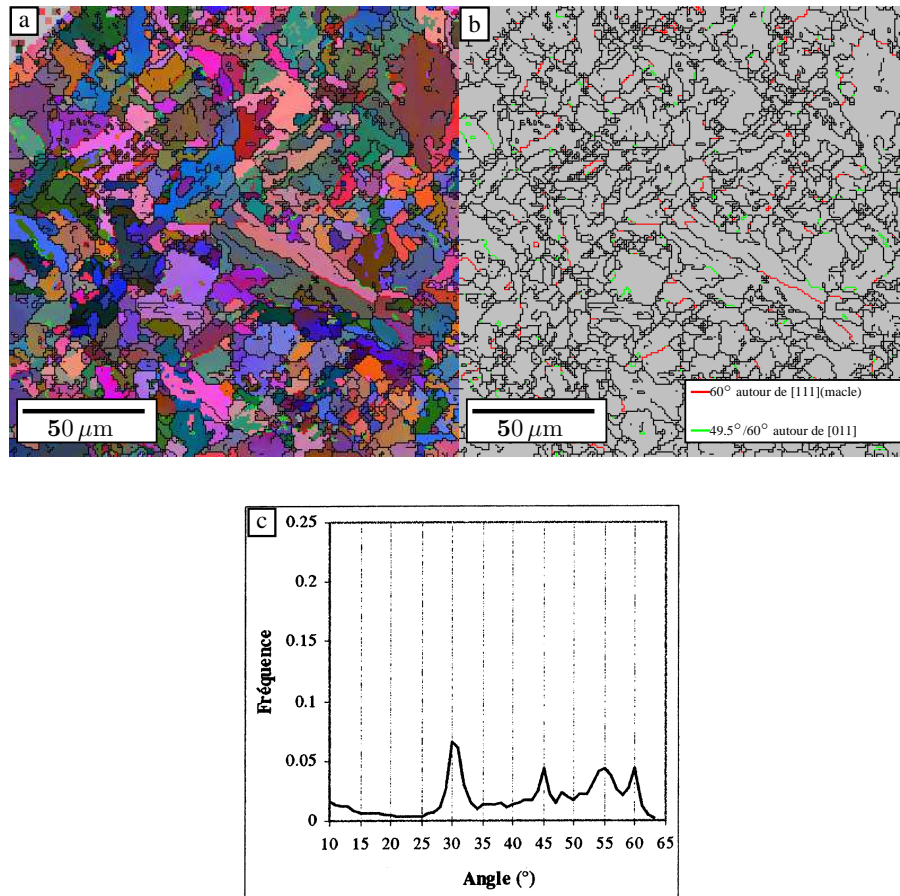


Figure 5: Acier 16MND5(1) observé par EBSD. a) Cartographie, b) Cartographie des joints, c) Histogrammes des angles de désorientation.

rupture fragile des carbures est préférentiellement perpendiculaire à leur plus grande dimension. Pour la description de la rupture par clivage, on s'intéressera donc à leur largeur (ou diamètre selon la forme de la section), qui est la longueur caractéristique vis-à-vis de la fissuration. Pour l'acier 18MND5(3), les fonctions de distribution de la largeur des carbures et du ratio R ou facteur de forme (longueur/largeur) ont été déterminées dans le cadre du post-doc de S. Bordet lors du projet d'option de Master de S. Osterstock (Osterstock et al., 2004)*. Elles sont reportées sur la figure 8.

Nous avons également observé la présence de zones apparemment "décarburrées" dans les aciers 16MND5(2) et 22NiMoCr37. Pour cette dernière nuance, la présence de ferrite pro-eutectoïde est une explication avancée. Une dureté de 170HV a été mesurée dans les zones décarburrées contre 200HV pour la matrice bainitique (Tanguy et al., 2003b)*. Cependant il n'a pas été possible de généraliser cette observation aux autres nuances car une analyse systématique n'a pu être effectuée.

Les aciers de cuve étudiés montrent une variabilité de microstructure d'un acier à l'autre⁷ : une taille d'ancien grain austénitique (γ) qui varie de $\bar{d} = 15\mu\text{m}$ (22NiMoCr37) à $\bar{d} = 25 - 30\mu\text{m}$ pour les autres nuances. L'acier X100 est caractérisé quant à lui par une microstructure en bandes avec une alternance

⁷Dans les études menées, on s'affranchit de la variabilité de microstructure suivant l'épaisseur de la cuve en se plaçant au 1/4 ou au 3/4 épaisseur.

de ferrite très fine et de bainite. Des composés Martensite-Austénite (M-A)⁸ ont par ailleurs été identifiés dans les bandes de bainite (fig. 7f).

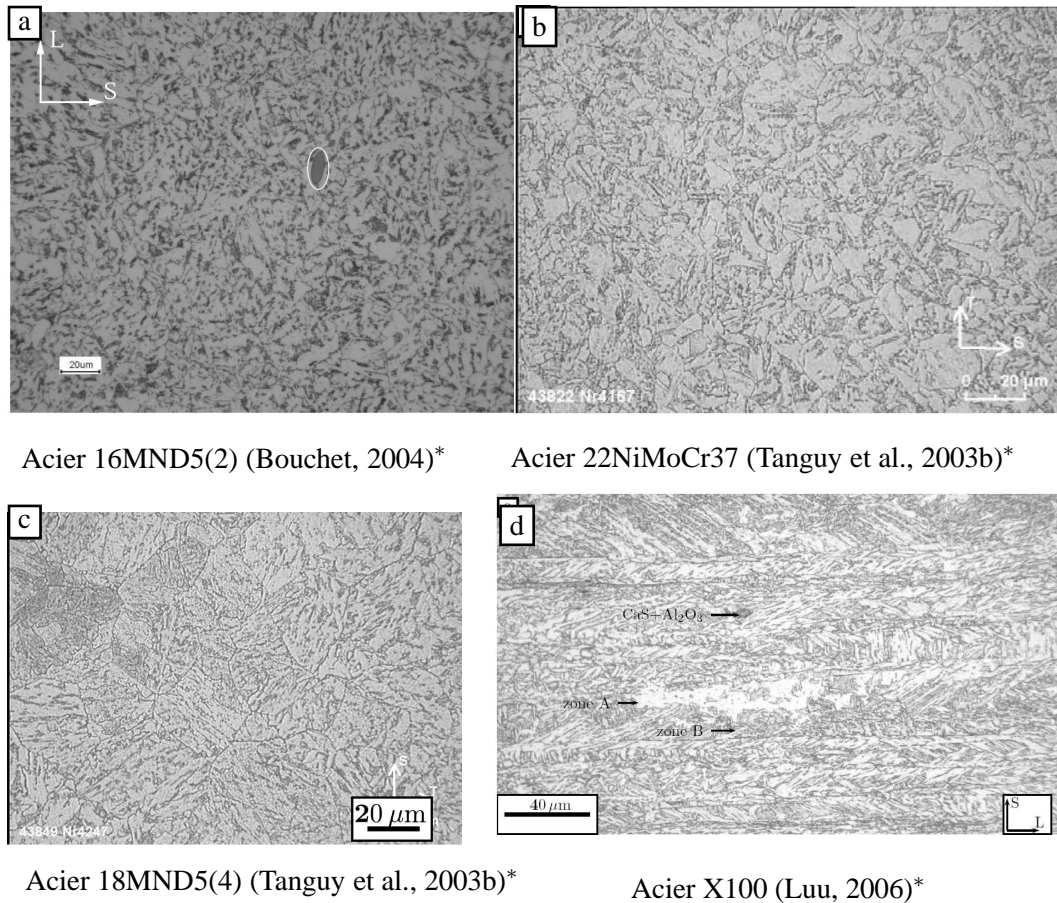


Figure 6: *Différentes microstructures étudiées (microscopie optique)*

La présence d'inclusions non-métalliques est inhérente à la nature *industrielle* de tous les aciers étudiés. Ces inclusions sont la conséquence de la présence d'éléments d'alliages résiduels introduits lors de l'élaboration des aciers, et leur présence est souvent⁹ évitée. La possibilité de contrôler la température de transition fragile-ductile par la maîtrise de la nocivité des inclusions a été étudiée lors du post-doc de S. Billard (Billard et al., 2007)* et lors du stage de Master de H. Orkhis*. Leur rôle dans les mécanismes de ruptures ductile et fragile étant clairement établi (voir par ex. (Benzerga, 2000) (Tanguy, 2001)*), une caractérisation inclusionnaire fine a été réalisée dans la plupart de nos études (Tanguy, 2001; Tanguy et al., 2003b; Bouchet et al., 2007; Luu, 2006; Bordet et al., 2006a)* et en particulier sur tous les aciers présentés ici. Les différentes inclusions observées sont illustrées sur la figure 9. Pour les aciers de cuve, la nature des inclusions observées est commune à toutes les nuances, il s'agit essentiellement de sulfures de Manganèse (MnS) purs ou multiphasés, et de nitrures de Titane purs ou multiphasés dans le cas spécifique du 18MND5(3). Quelques TiN ont néanmoins été identifiés comme responsables de l'initiation du clivage à très basses températures dans la nuance 16MND5(2) (Bouchet et al., 2007)*. En revanche,

⁸Ces composés ont été identifiés à l'origine des micro-fissures de clivage dans les zones affectées thermiquement de soudeure d'acier haute résistance (Lambert-Perlade et al., 2004).

⁹Notons que pour certaines applications tel que l'usinage, la présence d'inclusions peut être recherchée.

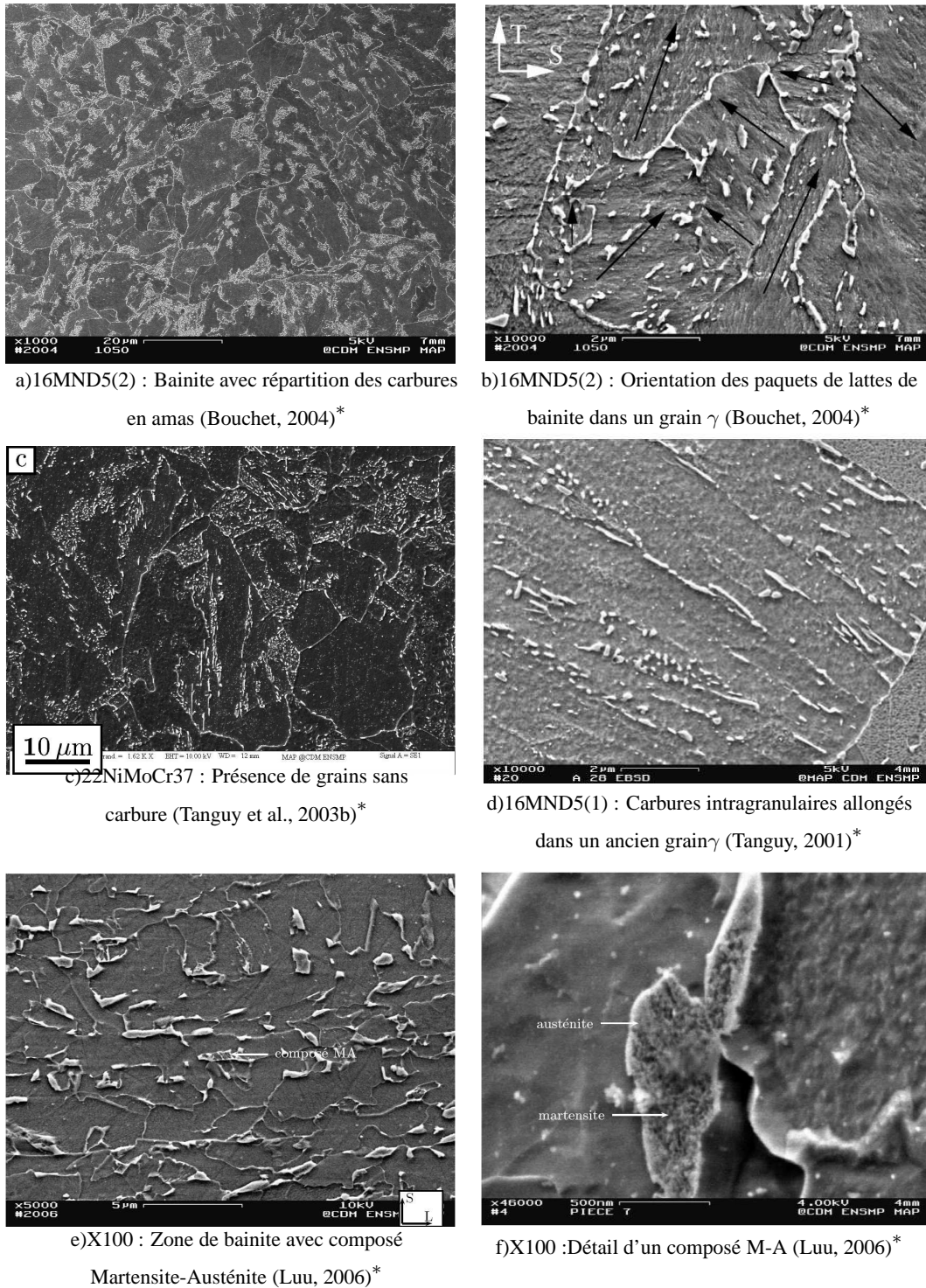


Figure 7: Différentes microstructures étudiées, et particules de seconde phase rencontrées (microscopie MEB)

leur fraction volumique, leur forme et leur répartition spatiale peuvent montrer des différences notables d'une nuance à l'autre. Ainsi contrairement à l'acier 16MND5, qui présente des inclusions de MnS plutôt globulaires, avec un facteur de forme proche de 1.2^{10} , et une distribution de tailles assez réduite

¹⁰Les inclusions observées sont allongées suivant la direction de laminage.

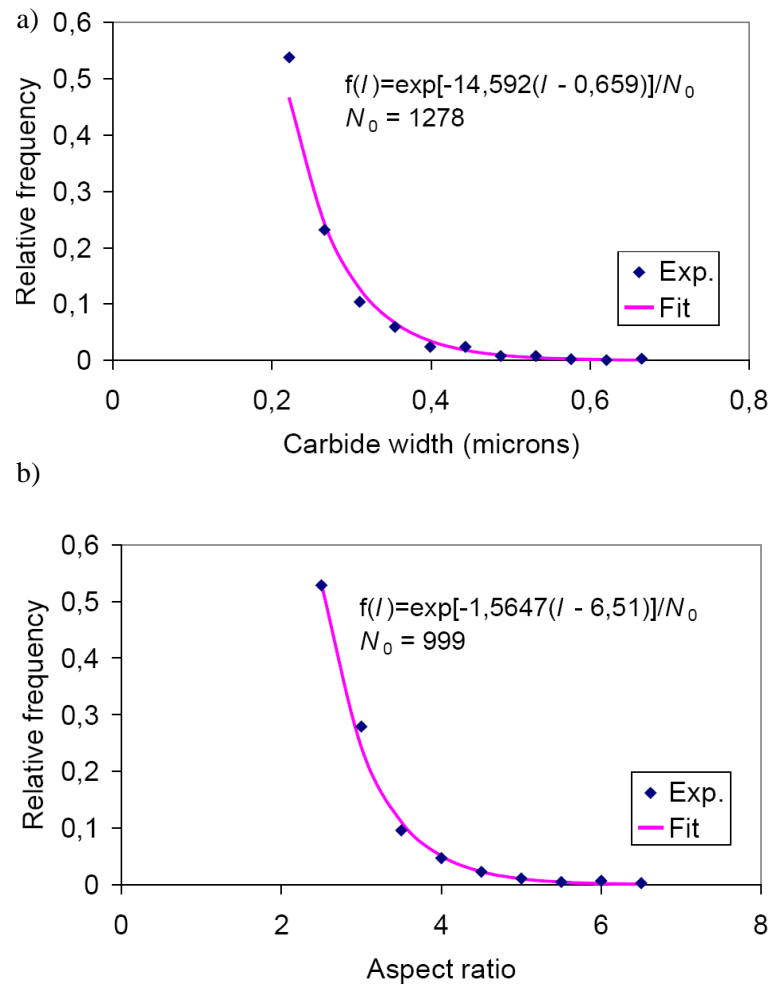


Figure 8: Fonctions de distribution de carbures pour l'acier 18MND5(3) (Osterstock et al., 2004; Bordet et al., 2006b)*. a) de largeur, b) de ratio R (longueur/largeur).

(entre 5 et $20\mu\text{m}$), et qui sont généralement isolées (présence rare d'amas), les aciers 22NiMoCr37 et 18MND5(4) montrent des inclusions de MnS très allongées (facteur de forme $\gg 5$) avec une tendance à la formation en "chapelets". Dans la nuance 16MND5(2), les inclusions de MnS sont plutôt globulaires, soit isolées, soit en amas. Une distance moyenne entre inclusions de MnS, $S^S = 160\mu\text{m}$ a été obtenue pour la nuance 16MND5(1) (Tanguy, 2001; Tanguy et al., 2005b)*. Pour la nuance 18MND5(3), les inclusions de MnS et de TiN sont distribuées de façon homogène, et sont souvent regroupées (TiN, MnS). Dans cette nuance les inclusions de TiN présentent une densité volumique beaucoup plus faible que les MnS, avec une distance moyenne interparticule de $400\mu\text{m}$, contre $95\mu\text{m}$ pour les MnS (Osterstock et al., 2004)*. Pour l'acier X100, on rencontre principalement deux familles d'inclusions, souvent mutiphasesées : $(\text{Al}_2\text{O}_3, \text{CaS})$ et (TiN, CaS) . Les premières ont une forme globulaire avec un diamètre moyen de l'ordre de $2\mu\text{m}$, les secondes ont une forme anguleuse avec un diamètre moyen de l'ordre de $5\mu\text{m}$.

La connaissance des inclusions présentes dans les matériaux étudiés, a-minima de leur nature, est un prérequis nécessaire pour la compréhension des mécanismes de rupture et pour donner un pouvoir prédictif aux modèles utilisés pour décrire la rupture. Nous montrerons par exemple dans la partie sur

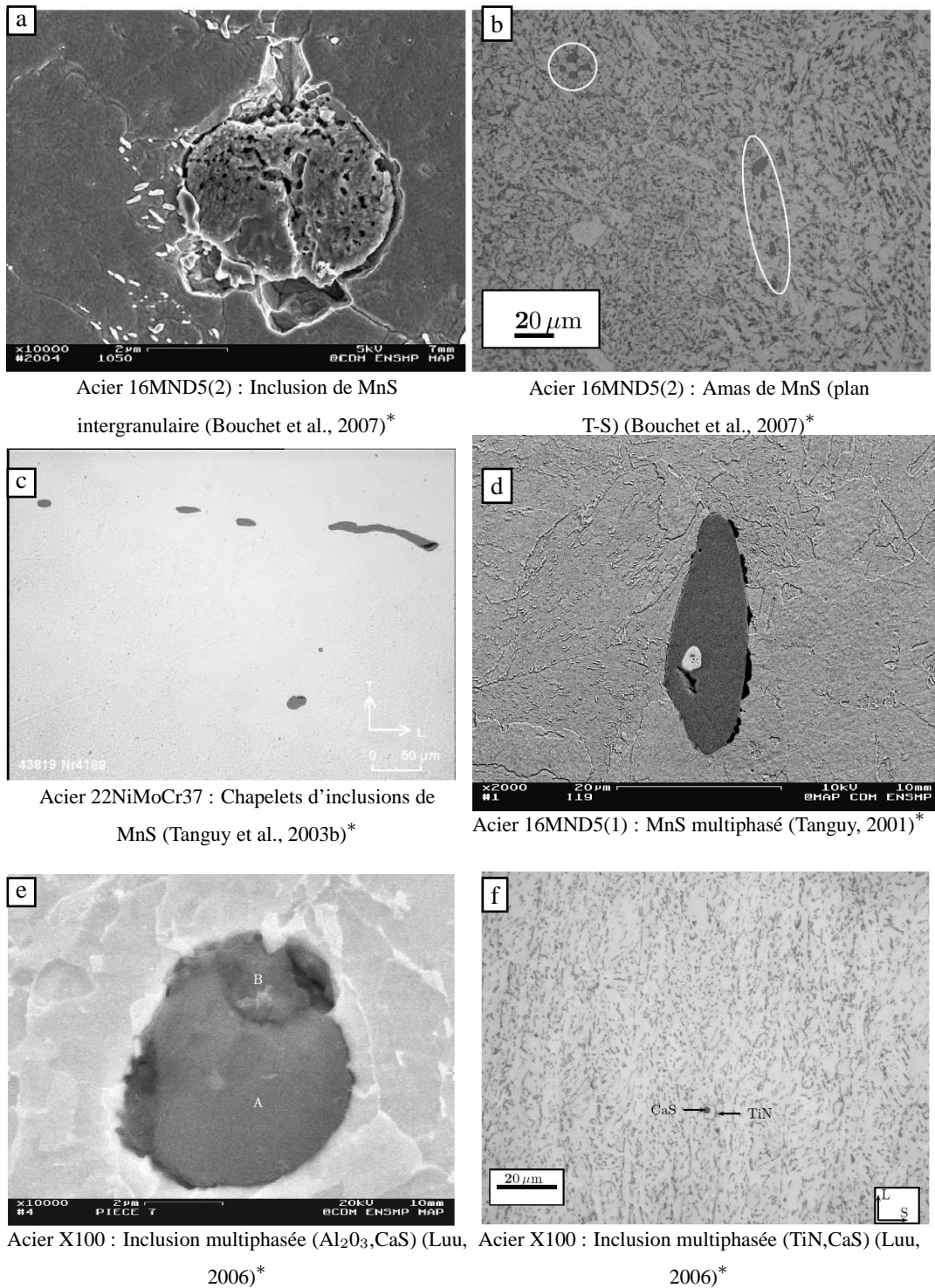


Figure 9: Exemples d'inclusions non-métalliques rencontrées dans les différentes microstructures étudiées.

la rupture ductile (chapitre III.) que la grandeur S^S permet de fixer le paramètre *taille de maille* des modèles couplés utilisés pour décrire la déchirure ductile.

III. L'endommagement et la rupture ductile dans les aciers

III.1. Introduction

Dans les travaux présentés ici, on s'intéresse aux matériaux métalliques où la rupture ductile est associée à un endommagement non négligeable. Cette rupture résulte d'un processus décrit par trois phases successives : la germination, la croissance et la coalescence de cavités qui conduisent à la création d'une microfissure. Les matériaux métalliques industriels étant rarement purs, les cavités prennent naissance à partir d'inclusions ou de particules de seconde phase, et leur croissance résulte de la déformation plastique. La phase de croissance est certainement la mieux connue, du moins pour des taux de triaxialité des contraintes importants, elle est celle qui a été modélisée en premier. Un des facteurs prédominant est la contrainte hydrostatique de tension. Deux catégories de modèles sont utilisées pour décrire l'endommagement ductile :

1. Les modèles non couplés. Ces modèles calculent l'endommagement à partir d'un calcul élastoplastique de la structure étudiée. Ce type de modèles assume que l'endommagement n'affecte pas le comportement global du matériau. L'instabilité due à la rupture est décrite par une valeur critique d'un paramètre d'endommagement.
2. Les modèles couplés. Ces modèles sont basés sur le couplage de l'endommagement et du comportement. Le potentiel plastique s'exprime en fonction de la porosité f qui est alors une variable interne du modèle. L'utilisation de ces modèles permet de décrire l'amorçage et la propagation de la fissure.

Parmi les premiers modèles non couplés de croissance de cavités, on citera les modèles de Mc Clintock (Mc Clintock, 1968) et de Rice et Tracey (Rice and Tracey, 1969). Parmi les modèles couplés, à partir d'approches différentes, Gurson (Gurson, 1977) et Rousselier (Rousselier, 1986; Rousselier, 1987; Rousselier, 2001) ont proposé des lois constitutives permettant de rendre compte du comportement de matériaux poreux où la variable d'endommagement est la fraction volumique de cavités. Un autre mode de rupture ductile, rencontré notamment dans les métaux purs, est dû à la localisation de la déformation plastique. Ce mode de rupture, qui nécessite des approches particulières, n'est pas traité dans ce mémoire. On se référera utilement à (Pineau and Pardoën, 2007) qui donnent une description exhaustive de la rupture ductile dans les métaux.

Au cours de nos travaux sur la rupture ductile, nous avons appliqué ces modèles à des matériaux élaborés industriellement. Une stratégie d'identification des paramètres de ces modèles a été mise en oeuvre et appliquée. Les prévisions ont été confrontées systématiquement à des résultats expérimentaux.

III.2. Les mécanismes d'endommagement et de rupture ductile

III.2.1. La germination

La germination est la création de cavités au cours du processus de déformation plastique. Les sites à partir desquels les cavités sont créées sont liés à des aspects métallurgiques et dépendent des champs mécaniques existants. La germination des cavités à partir des inclusions peut être le résultat d'une rupture par clivage de l'inclusion ou d'une rupture de l'interface inclusion/matrice. Dans les aciers étudiés, les deux types de germination peuvent être rencontrés :

- La figure 10a illustre la germination par la rupture par clivage d'une inclusion mixte (TiN,MnS) qui se produit pour une déformation en traction de 17% dans un acier bainitique de structure de (Billard et al., 2007)*.
- La figure 9d) qui illustre, dans l'acier 16MND5(1), une inclusion multiphasée de MnS sur une coupe polie, montre que la rupture de l'interface inclusion/matrice pour ce type d'inclusion apparaît pour des déformations très faibles (de l'ordre de 1 à 2%).
- La germination de cavités par les deux types de rupture, à partir des particules submicroniques de cémentite (Fe₃C) dans l'acier 16MND5(1) est illustrée sur la figure 10b).

De façon générale plusieurs types de particules peuvent être impliqués dans le processus de germination, on parle alors de "différentes populations". Si les différentes populations de particules impliquées ont des distributions spatiale et de tailles très différentes, la germination a lieu à des échelles différentes et pour des niveaux de déformation plastique différents, des interactions complexes entre les différentes phases d'endommagement (germination, coalescence) peuvent se produire. Cette germination à partir de différentes populations est rencontrée pour tous les aciers étudiés ici. Dans le cas des aciers de cuve, la première population correspond aux inclusions de MnS (fig. 9d) avec une germination qui est quasi-immédiate et la seconde population correspond aux carbures (fig. 10b)) avec une germination qui s'effectue pour des niveaux de déformation plastique élevés, typiquement de l'ordre de 50% en traction à la température ambiante. La germination s'effectue d'abord à partir des MnS pour de faibles déformations et contraintes, puis lorsque l'écoulement plastique continue, les carbures participent au processus de rupture. La germination à partir de ces petites inclusions a souvent lieu à l'intérieur de bandes de cisaillement intense entre les cavités germées autour des grosses inclusions ou alors entre une fissure interne et une surface libre. La seconde population de particules, dont la résistance interface-matrice est plus forte, sous l'effet des fortes déformations plastiques auxquelles elle est soumise, participe alors à la création de cavités (Ritchie et al., 1979). Cette germination *secondaire* est contrôlée par un critère en déformation (Pineau, 1981). Il est intéressant de noter que les particules qui participent à ce processus peuvent être les mêmes que celles qui déclenchent le clivage (carbures).

La germination étant liée à un processus de rupture, deux critères doivent être atteints (Argon et al., 1975) : un critère en contrainte associé à la rupture des forces de cohésion, et un critère local énergétique qui assure que suffisamment d'énergie sera disponible lors de la rupture pour la création de nouvelles surfaces. Ce dernier critère n'est critique que pour les inclusions submicroniques.

Il existe plusieurs modèles pour décrire la germination à partir de particules. On distingue cependant deux types d'approches selon la taille des particules :

1. critères incorporant l'interaction dislocation/particule, pour les particules avec un rayon jusqu'à 0.1– 1 μm ,
2. critères basés sur la déformation à l'échelle du milieu continu, pour les particules de taille plus importante.

On citera ici le critère proposé par Beremin (Beremin, 1981) à partir de l'analyse d'Eshelby pour une particule ellipsoïdale élastique, dans une matrice à comportement non-linéaire. Avec ce modèle, lors

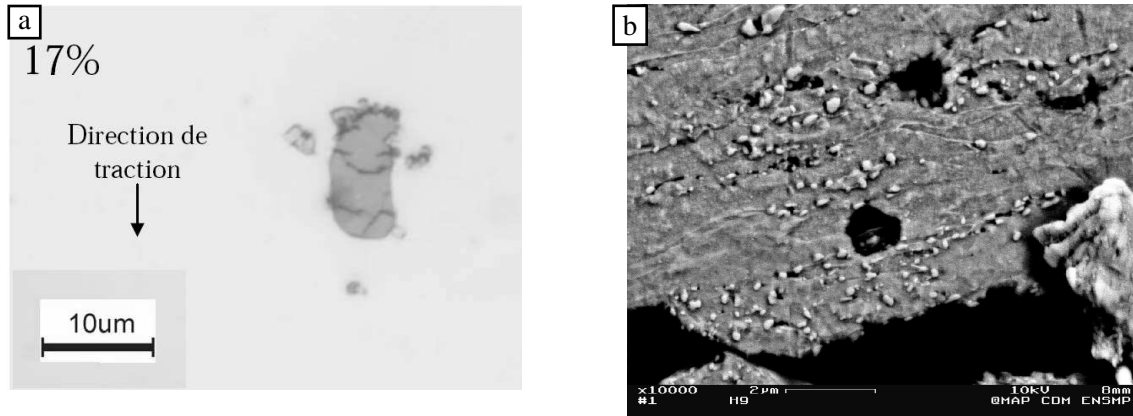


Figure 10: Mécanismes de germination de cavités : a) Acier bainitique de structure. Germination par rupture d'une inclusion après une déformation de traction de 17% (Billard et al., 2007)*, b) Acier 16MND5(1) Germination par rupture et décohésion sur une seconde population de particules (carbures) (Tanguy, 2001)*.

de la déformation de la matrice, la contrainte maximale est identique dans la particule et à l'interface particule/matrice. La rupture a lieu lorsque la contrainte maximale dans la particule ou à l'interface particule/matrice atteint une valeur critique, ce qui se traduit par le critère de rupture :

$$\sigma_1^p = \sigma_c^{particule} \text{ ou } \sigma_c^{interface} \quad (2)$$

avec des valeurs différentes pour les résistances à la rupture de la particule, $\sigma_c^{particule}$, et de l'interface particule/matrice, $\sigma_c^{interface}$.

La contrainte maximale dans la particule est donnée par :

$$\sigma_1^p = \Sigma_1 + \lambda \frac{\sigma_{eq} - \sigma_0}{\beta} \quad (3)$$

où β est un facteur plus grand que 1 qui tient compte de l'écroissage local dans le cas d'un comportement non-linéaire de la matrice et λ est fonction de la forme de l'ellipsoïde ($\lambda = 1$ pour une particule sphérique). Les résultats expérimentaux obtenus à partir d'inclusions de MnS allongées dans un acier 15MND5 montrent que la valeur de $\sigma_c^{interface}$ est indépendante de la température (Beremin, 1981), et que le type de rupture dépend de la direction de chargement. Une version statistique de ce critère a été proposée pour décrire l'amorçage surfacique de fissuration de fatigue à partir d'inclusions de nitrures de titane et de carbures de niobium dans un alliage Inconel 718 (Alexandre, 2006).

III.2.2. La croissance

L'effet de la triaxialité des contraintes sur la croissance de cavités a été étudié dans l'acier 16MND5 par (Beremin, 1980; Lautridou and Pineau, 1981; Marini et al., 1985). Ils observent une croissance de la taille des cupules avec la triaxialité. On peut observer le résultat de la croissance des cavités sur des

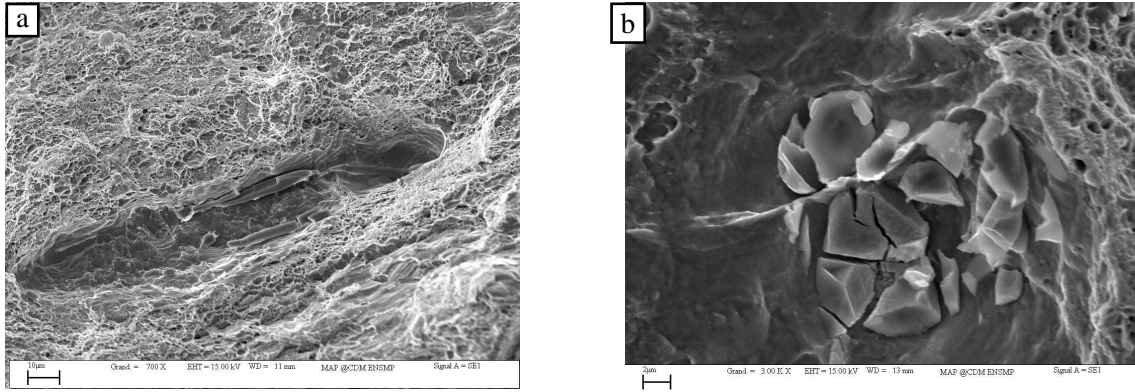


Figure 11: Acier 16MND5(2). Mécanisme de croissance des cavités à partir d'inclusions de sulfure de Manganèse (Bouchet et al., 2007)*. a) Cavité allongée obtenue à partir d'une inclusions allongée rompue, b) Cavité sphérique obtenue à partir d'une inclusion arrondie rompue.

photos au microscope électronique à balayage (MEB) des faciès de rupture. On montre sur la figure 11, dans l'acier 16MND5(2), des cavités issues d'inclusions de MnS allongées (fig. 11a) et rondes (fig. 11b).

Historiquement, un des modèles les plus utilisés pour décrire la phase de croissance des cavités est le modèle micromécanique de Rice et Tracey (Rice and Tracey, 1969). La description de la croissance d'une cavité sphérique dans une matrice rigide, incompressible et non-écrouissable soumise à un champ macroscopique uniforme conduit à l'expression (4).

$$\frac{dR}{R} = \alpha \exp\left(\frac{3}{2}\zeta\right) d\varepsilon_p \quad (4)$$

$$\text{avec} \begin{cases} \alpha & \text{constante (0.283 pour le modèle original)} \\ \zeta & \text{triaxialité } \left(\frac{\sigma_m}{\sigma_{eq}}\right) \\ \sigma_{eq} & \text{contrainte équivalente au sens de von Mises} \\ R & \text{rayon actuel de la cavité} \end{cases}$$

Dans cette expression, on montre expérimentalement que la paramètre α est une fonction croissante de la fraction inclusionnaire initiale (Marini et al., 1985). Pour l'acier 16MND5, la valeur $\alpha = 0.5$ est obtenue.

III.2.3. La coalescence

Le stade ultime de la rupture ductile est la coalescence des cavités. Ce mécanisme, difficile à étudier à cause de son caractère catastrophique, fait l'objet ces dernières années d'une attention particulière (voir e.g. (Benzerga, 2000; Pardoen and Hutchinson, 2000)). On considère généralement trois mécanismes de coalescence. Le premier correspond à la striction des ligaments entre les cavités existantes, le deuxième résulte de la localisation plastique, le troisième résulte de la formation d'une seconde population de cavités issue de "petites" particules dans les bandes de cisaillement intense (localisation de la déformation plastique) entre les cavités issues des "grosses" inclusions. La prédominance de l'un des

trois mécanismes dépendra de l'existence et de la répartition de la seconde population de particules. Les critères de coalescence doivent donc être reliés au mode de coalescence.

L'idée pionnière proposée par (Mc Clintock, 1968; McClintock, 1971) est de décrire la rupture lorsque la croissance des cavités atteint un taux de croissance critique. Dans cette modélisation, la description de la phase de coalescence elle-même n'est pas prise en compte. Le taux de croissance critique $\left(\frac{R}{R_0}\right)_c$ est obtenu à partir de l'expression (5).

$$\left(\frac{R}{R_0}\right)_c = \exp \int_{\varepsilon_0}^{\varepsilon_c} \alpha \exp\left(\frac{3}{2}\zeta\right) d\varepsilon_p \quad (5)$$

avec ε_0 : déformation plastique locale à l'amorçage de la décohésion.

Ce critère de rupture a été appliqué par (Lautridou and Pineau, 1981) avec succès sur un acier 16MND5. L'avantage de cette d'approche est sa simplicité : elle peut être appliquée en post-traitement de calculs élastoplastiques. Si cette modélisation simplifiée de la coalescence permet la transférabilité du paramètre $\left(\frac{R}{R_0}\right)_c$ des éprouvettes de laboratoires aux structures pour des porosités initiales faibles et des taux de triaxialité entre 1 et 1.5 (Rousselier, 1986), il est montré expérimentalement que le taux de croissance critique dépend du taux de triaxialité des contraintes lorsque celui-ci est important comme en pointe d'une fissure sur une éprouvette de type CT (Chaouadi et al., 1996), de plus l'anisotropie des cavités rencontrée dans certains aciers se traduit par une dépendance de $\left(\frac{R}{R_0}\right)_c$ de la direction de sollicitation. Enfin, l'application de cette approche pour simuler des propagations de déchirure se fait par la technique numérique de relachement de noeuds assez laborieuse à mettre en oeuvre.

Cette problématique de la propagation est traitée par l'utilisation des modèles couplés d'endommagement qui sont décrits au paragraphe suivant. Classiquement dans ces modèles, la phase de coalescence est traitée par l'introduction d'un paramètre f_c , équivalent au paramètre $\left(\frac{R}{R_0}\right)_c$, à partir duquel la phase de croissance des cavités est accélérée.

Une autre idée qui a permis une description plus physique de la phase de coalescence a été introduite par (Thomason, 1985) qui a proposé un critère de coalescence par localisation plastique : la coalescence se produit quand la charge limite plastique est atteinte dans le ligament entre deux cavités. Ce critère est utilisé dans les modélisations les plus avancées de la déchirure ductile où une surface d'écoulement est utilisée pour décrire la croissance et une autre pour décrire la coalescence (Pardoen and Hutchinson, 2003; Benzerga, A. and Besson, J. and Pineau, A., 2004a; Benzerga, A. and Besson, J. and Pineau, A., 2004b).

III.3. Endommagement couplé au comportement

III.3.1. Introduction

Au cours de nos études sur l'endommagement ductile et sur la modélisation de la déchirure ductile, nous avons été amenés à utiliser les modèles de Gurson–Tvergaard–Needleman dits GTN et/ou de Rousselier, en fonction de la problématique traitée et de la disponibilité de ces modèles dans les codes de calcul utilisés par nos partenaires industriels. Ces deux modèles sont, à l'origine, de nature différente : le modèle de GTN est fondé sur une analyse micromécanique, alors que le modèle de Rousselier a été développé dans un cadre thermodynamique. La nature micromécanique du modèle GTN apparaît séduisante dans le cadre de l'approche locale de la rupture, cependant les nombreuses modifications

inspirées par des observations phénoménologiques qui y ont été apportées relativisent son intérêt par rapport à celui du modèle de Rousselier. Ainsi le modèle GTN a été utilisé dans la thèse de T.T. Luu pour modéliser la déchirure ductile d'un acier haute résistance (X100) ayant un comportement mécanique anisotrope, et le modèle de Rousselier a été utilisé dans nos travaux de modélisation de l'essai Charpy¹¹ et de prévision des courbes de résilience et de ténacité en cas de fragilisation par l'irradiation. Avec ce type de modèle, l'amorçage et la propagation d'une fissure sont le résultat "naturel" de l'adoucissement local.

III.3.2. Le modèle GTN

Le modèle de Gurson est un modèle de croissance de cavités. Il ne prend pas naturellement en compte les phénomènes physiques intervenant lors de la rupture, tels que la coalescence. Il surestime donc considérablement les ductilités.

Le modèle micromécanique de Gurson, qui reste le modèle le plus employé dans le cadre de la rupture ductile, fournit un seuil de plasticité dont l'expression originelle (Gurson, 1977) est donnée par :

$$\Phi(\underline{\Sigma}, f, \sigma_0) = \frac{\Sigma_{eq}^2}{\sigma_0^2} + 2f \cosh\left(\frac{3\Sigma_m}{2\sigma_0}\right) - (1 + f^2) \quad (6)$$

$$\text{avec } \begin{cases} \underline{\Sigma} & \text{tenseur des contraintes macroscopiques (matrice + porosité),} \\ \Sigma_{eq} & \text{contrainte macroscopique équivalente au sens de von Mises,} \\ \Sigma_m = 1/3\Sigma_{kk} & \text{contrainte macroscopique moyenne,} \\ f & \text{taux de porosité du matériau,} \\ \sigma_0 & \text{limite d'élasticité de la matrice} \end{cases}$$

Il y a rupture (i.e., $\Phi = 0$ si $\underline{\Sigma} = \underline{0}$) pour une porosité f égale à 1. Ce modèle conduit à une forte surestimation de la ductilité réelle des matériaux. Il fut donc rapidement modifié afin de mieux prévoir le comportement lors de la rupture finale (Becker et al., 1988; Tvergaard, 1990) :

$$\Phi(\underline{\Sigma}, f, \sigma_Y) = \frac{\Sigma_{eq}^2}{\sigma_Y^2} + 2q_1 f^* \cosh\left(\frac{3q_2 \Sigma_m}{2\sigma_Y}\right) - (1 + q_1^2 f^{*2}) \quad (7)$$

où q_1 est un paramètre ajusté par exemple à partir de calculs sur cellules élémentaires matrice-porosité (Koplik and Needleman, 1988). Des valeurs entre 1.25 et 1.50 sont généralement employées (Koplik and Needleman, 1988; Tvergaard, 1982). A partir d'une analyse considérant deux populations de pores à des échelles différentes, (Perrin and Leblond, 1990) ont proposé la valeur $4/e \approx 1.47$. q_2 est généralement pris égal à 1. Toutefois, l'introduction du paramètre q_1 amène une modification mineure par rapport à l'emploi de la fonction f^* (porosité effective) au lieu de la porosité réelle f dans le modèle de Gurson. La forme proposée pour la fonction f^* est la suivante:

$$f^*(f) = \begin{cases} f & \text{si } f \leq f_c, \\ f_c + \delta(f - f_c) & \text{sinon.} \end{cases} \quad (8)$$

¹¹On trouvera dans ces derniers travaux une étude comparative des résultats obtenus avec les modèles de Rousselier et GTN (Tanguy, 2001)*.

$$\text{avec } \begin{cases} \delta = \frac{f_U^* - f_c}{f_F - f_c} \\ f_U^* \text{ porosité effective à rupture, } f_U^* = 1/q_1 \\ f_F \text{ porosité à rupture.} \end{cases}$$

L'introduction de f^* se justifie par le fait qu'au delà d'une porosité critique f_c , il y a coalescence, de sorte que la porosité est plus endommageante que si elle restait sphérique (fig. 12). Cette modification reste toutefois phénoménologique et les coefficients q_1 , f_c et δ doivent être identifiés à partir d'expériences incluant des éprouvettes de type traction (avec ou sans entailles) et des éprouvettes fissurées. L'identification demande donc des calculs assez coûteux.

Une description plus physique de la phase de coalescence a été proposée depuis par plusieurs auteurs. On trouvera dans les références suivantes (Benzerga et al., 1999; Zhang et al., 2000; Pardoën and Hutchinson, 2000; Siruguet and Leblond, 2004b; Siruguet and Leblond, 2004a) plusieurs modélisations de ce mécanisme.

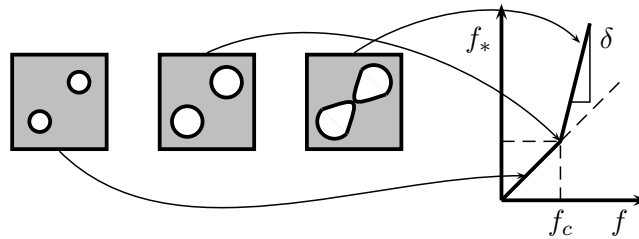


Figure 12: Origine physique et rôle de la fonction f^*

L'évolution de la porosité est le résultat de la germination de nouvelles cavités et de la croissance des cavités déjà existantes. La loi d'évolution de la fraction volumique de porosité est donnée par :

$$\dot{f} = \dot{f}_{\text{croissance}} + \dot{f}_{\text{germination}} = (1 - f)\text{trace}\dot{\underline{\underline{E}}}_p + B_n\dot{\sigma}_{eff} + A_n\dot{p} \quad (9)$$

$$f(t = 0) = f_0 \quad (10)$$

où $\dot{\sigma}_{eff} = \alpha\dot{\sigma}_{eq} + \beta\dot{\sigma}_{kk}$. B_n et A_n peuvent être assimilés aux intensités de germination contrôlées en contrainte et en déformation, respectivement. On ne considère généralement que le terme A_n dans la description de la cinétique de germination, les lois de germination en pression hydrostatique posant des problèmes numériques (Tvergaard, 1990). Une loi de germination doit contenir deux aspects : l'instant du déclenchement de la germination et la quantité de cavités créées. Trois types de lois possibles sont schématisés sur la figure 13 (Zhang and Hauge, 1999).

III.3.3. Le modèle de Rousselier

Le modèle de Rousselier¹² (Rousselier, 1986; Rousselier, 1987; Rousselier, 2001), établi dans le cadre d'une approche thermodynamique, introduit deux variables d'état pour décrire le matériau : p la déformation plastique cumulée et f l'endommagement défini comme la fraction volumique de cavités.

¹²Une reformulation du modèle dans le cadre des matériaux standards généralisés a été récemment proposée par (Lorentz et al., 2008).

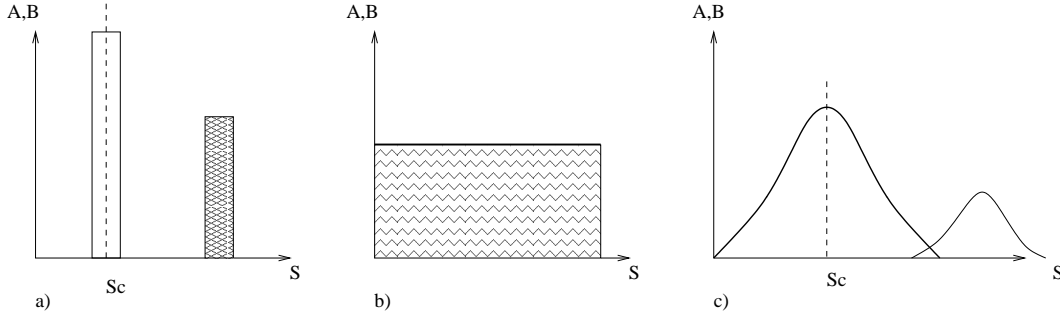


Figure 13: Modèles de lois de germination (d'après (Zhang and Hauge, 1999)) a) germination en amas b) germination continue c) germination statistique (Chu and Needleman, 1980). S : déformation plastique, S_c : déformation plastique critique, B , A : intensités de germination contrôlées en contrainte et en déformation, respectivement.

La surface de charge est définie par :

$$\Phi = \tilde{\Sigma}_{eq} - R(p) + f\sigma_1 D \exp\left(\frac{\tilde{\Sigma}_m}{\sigma_1}\right) = 0 \quad (11)$$

$$\text{avec } \left\{ \begin{array}{l} \tilde{\Sigma} = \Sigma/\rho : \text{tenseur des contraintes effectives} \\ \rho = (1 - f) : \text{densité relative du matériau par rapport au matériau idéal dense} \\ \tilde{\Sigma}_{eq} : \text{contrainte effective équivalente au sens de von Mises} \\ \tilde{\Sigma}_m = \frac{1}{3}\tilde{\Sigma}_{kk} : \text{la contrainte effective moyenne} \\ R : \text{limite d'écoulement du matériau non endommagé} \\ \sigma_1 \sim \frac{2}{3}R_m \sim (R_e + R_m)/3 \text{ (Rousselier, 1986)} \end{array} \right.$$

Le paramètre σ_1 dépend du matériau, il représente la résistance de la matrice à la croissance et à la coalescence des cavités. D , par analogie avec le modèle de Rice et Tracey, varie entre 1.5 et 2.1.

La surface de charge du modèle de Rousselier possède la propriété particulière de préserver une composante de cisaillement, même pour des forts niveaux de triaxialité, contrairement au modèle GTN (fig. 14). Cette particularité permet au modèle de Rousselier de décrire naturellement, sans utiliser de lois de germination et de coalescence, la transition entre une rupture plate et une rupture en biseau (Besson et al., 2001; Besson et al., 2003). Pratiquement, lors de propagation importante, des problèmes de convergence numérique ont amené (Kusmaul et al., 1993) à introduire dans le modèle une cinétique de germination et une loi d'accélération de la croissance.

III.3.4. Identification des paramètres des modèles

Les modèles GTN et de Rousselier présentent un nombre conséquent de paramètres à identifier, ce qui potentiellement peut rendre difficile leur utilisation. Dans le cas du modèle GTN, on trouve :

- des paramètres décrivant l'écoulement de la matrice; leur nombre dépend de la complexité du comportement du matériau (isotrope ou anisotrope),
- des paramètres associés au potentiel plastique, q_1 et q_2 ,

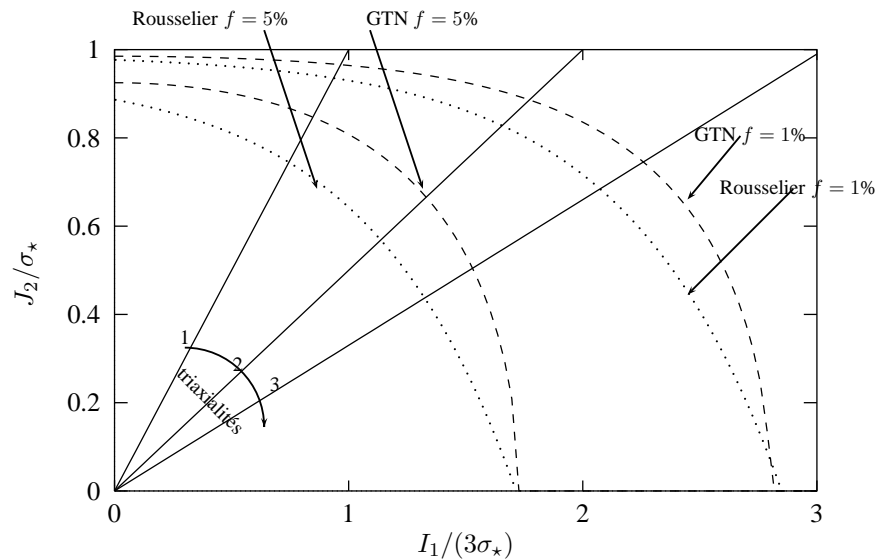


Figure 14: Surfaces d'écoulement plastique obtenues avec les modèles GTN et de Rousselier pour une porosité de 1% et 5% ($q_1 = 1.5$, $q_2 = 1$, $f^* = f$, $D = 2$, $\sigma_1/\sigma_* = 2/3$). ($I_1 = \Sigma_{kk}$ et $J_2 = \Sigma_{eq} = (3/2 S_{ij} S_{ij})^{1/2}$)

- des paramètres associés à la germination des cavités, qui apparaissent dans la fonction A_n ,
- des paramètres associés à la croissance des cavités en mode coalescence (par ex. δ et f_c),
- le paramètre "taille de maille" lorsqu'un endommagement localisé doit être décrit.

L'identification et la détermination des paramètres reposent sur une approche combinant expérimentation et simulation. Cependant l'utilisation unique des résultats d'essais mécaniques macroscopiques pour identifier ces paramètres peut conduire à plusieurs jeux de paramètres équivalents (He et al., 1998). On montre par exemple qu'il est possible de décrire l'amorçage d'une fissure sans utiliser la fonction f^* (Geney, 1998). A partir d'études paramétriques et expérimentales, il est montré que :

- f_c dépend peu du taux de triaxialité des contraintes quand la fraction volumique de porosité initiale f_0 est faible, résultat obtenu à partir d'études numériques (Koplik and Needleman, 1988; Schmitt et al., 1994a) et expérimentales (Lautridou and Pineau, 1981); pour f_0 élevé ($1 \cdot 10^{-2}$), f_c diminue quand la triaxialité augmente (Zhang and Niemi, 1995); dans les matériaux que nous avons étudiés, la fraction volumique initiale de porosité est égale à $1.75 \cdot 10^{-4}$, valeur inférieure à $f_0 = 1.3 \cdot 10^{-3}$ pour laquelle l'indépendance du paramètre f_c vis-à-vis de la triaxialité est obtenue dans l'étude de (Zhang and Niemi, 1995),
- f_c dépend peu de la vitesse de sollicitation (Brocks et al., 1995) et de la température (Brocks et al., 1996),
- f_c dépend de f_0 et de la fraction de cavités germées, lorsque la germination est considérée (Zhang, 1996),

- pour les faibles f_0 , une relation linéaire est proposée entre f_c et f_0 (Zhang and Niemi, 1995), qui montre que ces deux paramètres ne sont pas indépendants,
- le couple σ_1, D n'est pas unique pour une taille de maille fixée (Li et al., 1994).

L'utilisation de ce type de modèles nécessite donc de développer une stratégie d'identification des paramètres qui repose le plus possible sur l'étude des mécanismes physiques d'endommagement. Pour les matériaux métalliques avec une faible porosité initiale¹³, le comportement de la matrice est obtenu par celui du matériau, soit en traction, soit en compression (Devillers-Guerville, 1998). Les paramètres associés à l'endommagement (f_0, A_n) doivent être identifiés à partir de l'étude de la microstructure et des mécanismes d'endommagement¹⁴. On montre qu'il est possible de bien décrire l'endommagement ductile d'un acier bainitique faiblement allié, avec ou sans description de la germination (Tanguy, 2001)* (Rossoll, 1998), ce qui conduit à des paramètres de rupture très différents. Les valeurs des paramètres q_1 et q_2 sont souvent celles données dans (Tvergaard, 1981), il est cependant possible de les identifier à partir d'une modélisation micromécanique et de la connaissance de comportement de la matrice et des paramètres (f_0, A_n). Les paramètres décrivant l'accélération de la croissance (f_c, δ) et la discrétisation spatiale (la taille de maille dans les calculs éléments finis) dans le cas de gradients mécaniques importants, sont identifiés sur des géométries avec une propagation de fissure. Dans nos études sur l'acier de cuve 16MND5(1), la taille de maille, représentative de l'échelle de la localisation de l'endommagement, a été fixée à partir de la distance moyenne entre les inclusions de MnS, S^S (voir chapitre II.). Les essais sur éprouvettes entaillées (NT) pilotés en vitesse de déformation radiale, donnant lieu à une propagation de la déchirure maîtrisée, peuvent être utilisés à cette fin. On peut également déterminer ces paramètres à partir d'essais sur éprouvettes fissurées. Le paramètre f_c peut être également déterminé à partir d'un critère de localisation de type Thomason (Zhang and Niemi, 1995), ce qui permet de prendre en compte intrinsèquement les variations de la porosité critique avec l'état de chargement.

La problématique de l'identification des paramètres des modèles d'endommagement ductile a été étudiée dans le groupe TC8 ("Numerical round robin on micro-mechanical models", Bernauer et Brocks 2002) de l'ESIS, ainsi que dans le groupe français "Charpy instrumenté" de la SF2M, auxquels j'ai participé. Ce travail montre que les paramètres permettant de simuler des résultats expérimentaux "macroscopiques" peuvent être très différents selon la modélisation utilisée (taille de maille, modélisation tridimensionnelle, type d'élément, propagation le long d'un plan de symétrie). De plus, pour une même modélisation, les résultats peuvent varier en fonction des paramètres de convergence et de l'incrément en temps en relation avec la stratégie de calcul adoptée dans les codes éléments finis.

Il est donc important que la démarche d'identification des paramètres soit adaptée au matériau étudié et au(x) mécanisme(s) d'endommagement prépondérant(s). On trouvera différents exemples dans (Berdin and Hausild, 2002). La démarche proposée dans nos propres études (Tanguy, 2001; Luu, 2006) pour les aciers renfermant une faible fraction initiale de cavités combine des essais

¹³Lorsque la porosité initiale est trop importante, le comportement de la matrice dense ne peut être obtenu par celui du matériau. Afin de limiter le développement trop important de la fraction volumique de cavités et donc de pouvoir considérer le matériau comme équivalent à la matrice dense, on se place classiquement avant la striction.

¹⁴Un grand nombre d'études sur l'endommagement ductile reprend les paramètres proposés dans (Chu and Needleman, 1980) sans considérer la nature de la microstructure étudiée.

macroscopiques, des informations métallurgiques et des observations microstructurales qui permettent, au moins qualitativement de discriminer les cinétiques d'endommagement. Cette démarche est décrite dans les articles (Tanguy et al., 2008)* et (Tanguy et al., 2005b)* reportés dans ce mémoire.

III.4. Endommagement ductile et comportement plastique anisotrope

La modélisation de l'endommagement ductile pour les structures dont l'élaboration conduit à une forte anisotropie des propriétés mécaniques nécessite a-minima d'introduire l'anisotropie dans les modèles d'endommagement. Les anisotropies peuvent être de deux natures : celle induite par le comportement plastique et celle induite par le développement de l'endommagement. La prise en compte de l'une ou/et de l'autre doit être décidée à partir d'observations des mécanismes d'endommagement et d'essais mécaniques dans les différentes directions métallurgiques induites par le process de fabrication.

La modélisation de la déchirure ductile dans les tôles d'acier haute résistance (X100) utilisées pour la fabrication des gazoducs a été l'objet de la thèse de T.T. Luu. Trois nuances d'acier X100 ont été étudiées (Luu, 2006)*. Sur cette gamme d'aciers modernes, les caractéristiques (forme et distribution spatiale) des inclusions à partir desquelles l'endommagement ductile se développe (essentiellement CaS, TiN, carbures de fer et îlots Martensite-Austénite) conduisent en première approximation à un endommagement isotrope, contrairement aux nuances plus anciennes contenant des inclusions de sulfure de manganèse (Benzerga et al., 1999; Benzerga, A. and Besson, J. and Pineau, A., 2004a; Benzerga, A. and Besson, J. and Pineau, A., 2004b).

La modélisation proposée ne considèrerait donc que l'anisotropie du comportement, la prise en compte de l'anisotropie d'endommagement constituerait sûrement une voie d'amélioration pour la modélisation de la déchirure ductile de cet acier. En effet des calculs de cellules élémentaires montrent qu'une cavité sphérique dans une matrice anisotrope soumise à une pression hydrostatique ne reste pas sphérique.

L'anisotropie plastique de comportement est classiquement décrite par le modèle de Hill (Hill, 1950). Cependant le formalisme du modèle de Hill ne lui permet pas de décrire à la fois l'anisotropie des contraintes et celle des déformations observées sur ce type de matériau (Rivalin et al., 2000). Un nouveau modèle développé pour décrire l'anisotropie dans les tôles d'aluminium (Bron and Besson, 2004) a donc été utilisé¹⁵. Cependant la souplesse apportée par ce modèle se fait au détriment du nombre de paramètres à déterminer, qui nécessite une large base expérimentale. On trouvera une synthèse des résultats obtenus sur la modélisation de l'endommagement ductile dans l'acier X100 dans l'article (Tanguy et al., 2008)* reporté à la fin de cette partie. Il y est montré que la modélisation proposée a permis de reproduire correctement l'évolution de la charge au cours de différents types d'essais mécaniques sur des éprouvettes de géométries déformation plane, Charpy et préfissurées. Ces géométries sont illustrées sur la figure 15.

Par ailleurs, l'outil numérique développé nous a permis de proposer une analyse de l'effet de l'anisotropie plastique de comportement sur la cinétique de la déchirure ductile dans des structures avec des états mécaniques complexes.

Au niveau des mécanismes de l'endommagement ductile, on a observé, à partir de l'analyse du faciès de rupture des éprouvettes entaillées NT, l'augmentation de la population des petites cavités, amorcées sur des particules de seconde phase martensite/austénite et sur les carbures avec la diminution de la

¹⁵une version isotrope de ce modèle a été utilisée dans la thèse de C. Bouchet pour la modélisation des essais de ténacité (Bouchet et al., 2006a; Tanguy et al., 2006c)*.

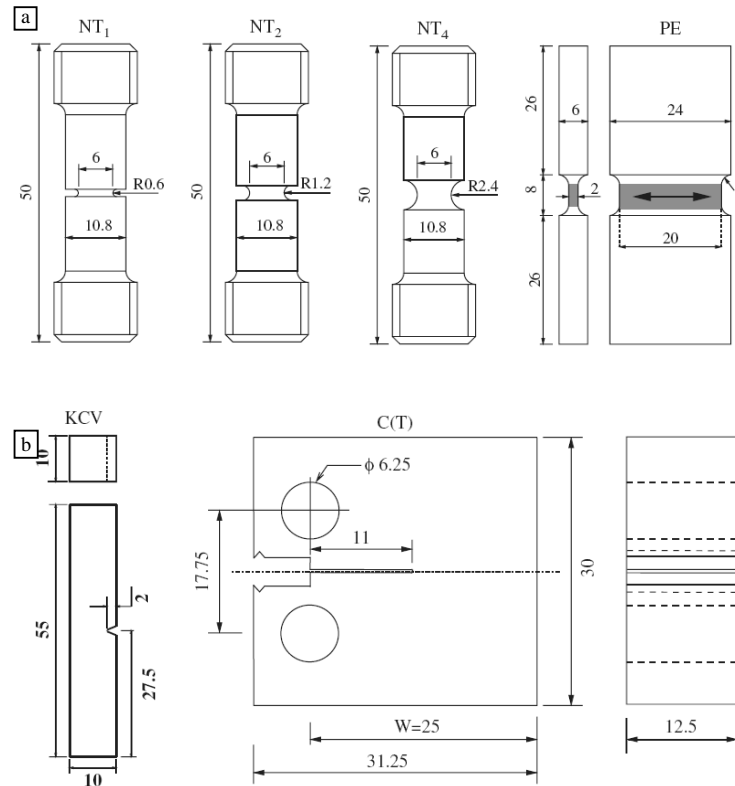


Figure 15: Géométries d'éprouvettes utilisées pour identifier et valider la modélisation de la déchirure ductile sur l'acier X100 : a) géométries axisymétriques entaillées (NT) et déformation plane (PE), b) géométries Charpy (KCV) et C(T) préfissurée.

triaxialité, au détriment des grosses cupules germées sur des inclusions monophasées de sulfure de calcium (CaS) ou multiphasées (CaS,TiN). Cette observation a mis en évidence que, pour les faibles triaxialités et pour les fortes déformation, la seconde population de particules contrôle la rupture ductile. Cette observation est confirmée à partir des faciès de rupture des éprouvettes Charpy, composés d'une zone de rupture plate au centre et d'une zone de rupture en biseau sur les bords, là où la triaxialité est plus faible. Dans ces lèvres de cisaillement, seule la seconde population de cavités est observée (Luu et al., 2006a)*. Des résultats similaires ont été obtenus sur l'acier de cuve 16MND5(1) (Tanguy, 2001)*.

III.5. Etude de la déchirure ductile sous sollicitation rapide

Contrairement aux essais classiques de laboratoire où l'endommagement ductile se développe à des vitesses quasi-statiques, la déchirure ductile lors de l'essai Charpy et celle lors de l'éclatement d'un gazoduc ont pour traits communs qu'elles apparaissent lors de sollicitations rapides, de plusieurs mètres par seconde. Lors du choc de l'éprouvette Charpy, la vitesse de la déchirure ductile est proche de celle du marteau, soit entre 5 et 3 m/s entre l'instant de l'impact et la rupture complète de l'éprouvette. La déchirure ductile dynamique résultant de l'éclatement d'un gazoduc se propage, elle, à une vitesse initiale de l'ordre de la vitesse de l'onde de décompression du gaz, soit de l'ordre de 300 m/s. L'arrêt rapide de cette propagation dynamique n'est dû qu'à la capacité du matériau à faire ralentir la propagation dynamique à une vitesse inférieure à celle de l'onde de décompression, la pointe de fissure étant alors

déchargée. Pour ces conditions de chargement, des vitesses de déformation locales de l'ordre du millier de s^{-1} et des échauffements locaux importants de l'ordre de la centaine de degrés sont rencontrés dans la zone de l'endommagement pour l'essai Charpy (Norris, 1979) (Tanguy et al., 2005b)*.

Historiquement l'aptitude à l'arrêt de la propagation dynamique de la déchirure ductile est basée sur des corrélations empiriques établies lors de campagnes expérimentales, très coûteuses, d'éclatement de tubes de gazoducs. Pour un matériau donné, ces corrélations ont relié la contrainte admissible dans le tube à l'énergie Charpy obtenue à partir d'éprouvettes réduites. La mise en défaut de ces corrélations pour les nuances modernes d'aciers pour gazoducs a conduit au développement de nouvelles corrélations, basées sur des calculs numériques de propagation et sur un critère de rupture du matériau, le $CTOA_c$ (Crack Tip Opening Angle) déterminé sur des éprouvettes de laboratoire (O'Donoghue et al., 1997). Ce type de corrélation, utilisant un paramètre de l'approche globale de la rupture, ne peut s'appliquer que si les essais de laboratoire sont représentatifs des conditions rencontrées à la pointe de la fissure lors de la propagation dynamique, ce qui est rarement le cas. L'étude de cette problématique par l'approche locale de la rupture a donc été envisagée.

Pour alimenter les modélisations et notamment la connaissance des mécanismes de rupture sous ce type de sollicitation, il est important de disposer de moyens expérimentaux permettant de reproduire ou, au moins, d'approcher les conditions rencontrées sur la structure réelle. Ces essais dynamiques en laboratoire avaient été développés au Centre des Matériaux avec les études relatives à l'arrêt de fissure de clivage d'aciers faiblement alliés (Di Fant et al., 1990; Iung and Pineau, 1996b; Iung and Pineau, 1996a; Bouyne et al., 2001). Les moyens expérimentaux d'Arcelor avaient été utilisés pour étudier la propagation dynamique de la déchirure ductile sur des aciers pour gazoducs de grade X70 avec différentes microstructures (Iung, 1994; Rivalin et al., 2001b; Rivalin et al., 2001a).

L'étude expérimentale de la déchirure ductile dynamique au cours de l'essai Charpy a été réalisée par des essais interrompus où l'énergie initiale du marteau a été choisie afin de conduire à une rupture partielle de l'éprouvette, le marteau étant rattrapé lors de son rebond avant qu'il ne ré-impacte l'éprouvette (Tanguy, 2001)*. Des examens métallographiques de coupes réalisés sur ces éprouvettes ont permis de visualiser le développement de l'endommagement ductile (Tanguy, 2001; Tanguy et al., 2005b)*.

L'étude expérimentale de la déchirure ductile dynamique sur les gazoducs est plus difficile. Cela a conduit T.T. Luu, au cours de sa thèse (Luu, 2006; Luu et al., 2006b)*, à réaliser des essais de déchirure ductile dynamique (D3). Il a pour cela, remis en état et utilisé le dispositif expérimental unique¹⁶ (fig. 16) situé dans les laboratoires d'Arcelor-Mittal, anciennement IRSID, qui permet de reproduire à une échelle intermédiaire entre les éprouvettes Charpy et le tube de gazoduc, les vitesses de propagation rencontrées lors de l'éclatement d'un gazoduc.

Des essais réalisés à partir d'éprouvette D3 (fig. 17a), permettant de propager des fissures en mode de déchirure ductile, à des vitesses entre 30 et 40 m/s, sur des distances de 180 mm ont ainsi été réalisés. Les éprouvettes D3 ont la particularité d'avoir la même épaisseur que la tôle servant à élaborer le tube pour gazoduc. Ces essais ont permis d'une part, de reproduire la déchirure en biseau (fig. 17b) observée lors de l'éclatement d'un gazoduc, et d'autre part, d'accéder à l'énergie dissipée au cours de la propagation de la fissure, à laquelle la modélisation devra être confrontée. Des essais *interrompus* où la fissure est arrêtée au cours de sa propagation en mode dynamique (fig. 17a) ont également été réalisés, ils permettent de

¹⁶Ce dispositif a bien failli disparaître pour des raisons économiques!

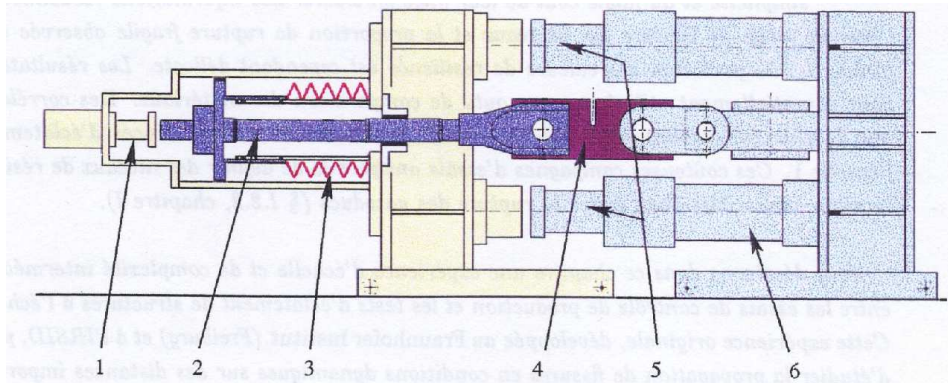
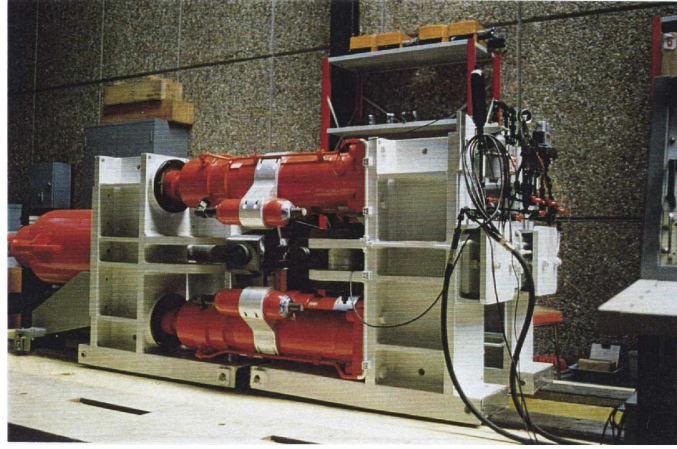


Figure 16: *Machine de traction dynamique de capacité 4000kN à Arcelor Research utilisée pendant la thèse de T.T. Luu(Luu, 2006)*.*

visualiser l'aspect fortement courbé du front de fissure (fig. 17b) et les différents mode de propagation de la fissure : l'amorçage de la fissure par un mode de cisaillement, suivi d'une étape de propagation en mode d'ouverture avec une rupture plate, puis d'une propagation en mode de cisaillement. Chacune des zones associées à ces modes de propagation est associée à la présence prépondérante d'un des deux types de cavités décrits au paragraphe III.4..

Compte tenu des vitesses de sollicitation, il a fallu également s'interroger sur le rôle des effets inertiels sur l'endommagement ductile pour les essais Charpy et les essais D3. Pour des vitesses de sollicitation très élevées, les effets inertiels ralentissent la croissance des cavités, notamment pour les faibles porosités et les grosses cavités (Tong and Ravichandran, 1995) et d'autant plus que le matériau a un comportement peu sensible à la vitesse de déformation (Ortiz and Molinari, 1992; Tong and Ravichandran, 1995), L'effet de viscosité qui retarde la croissance dès le début du chargement, s'ajoute aux effets inertiels dans le ralentissement de la croissance des cavités (Basu and Narasimhan, 1999). (Tvergaard and Needleman, 1988) ont montré, par la simulation numérique de l'essai Charpy, que lorsque la déchirure ductile s'amorce dans l'éprouvette, les effets inertiels sont négligeables. Ces résultats sont validés par (Wang and Jiang, 1997) qui mettent en évidence que, pour des vitesses de déformation macroscopiques inférieures à 1000 s^{-1} , la croissance des cavités n'est pas modifiée par les effets inertiels. Nous avons donc négligé

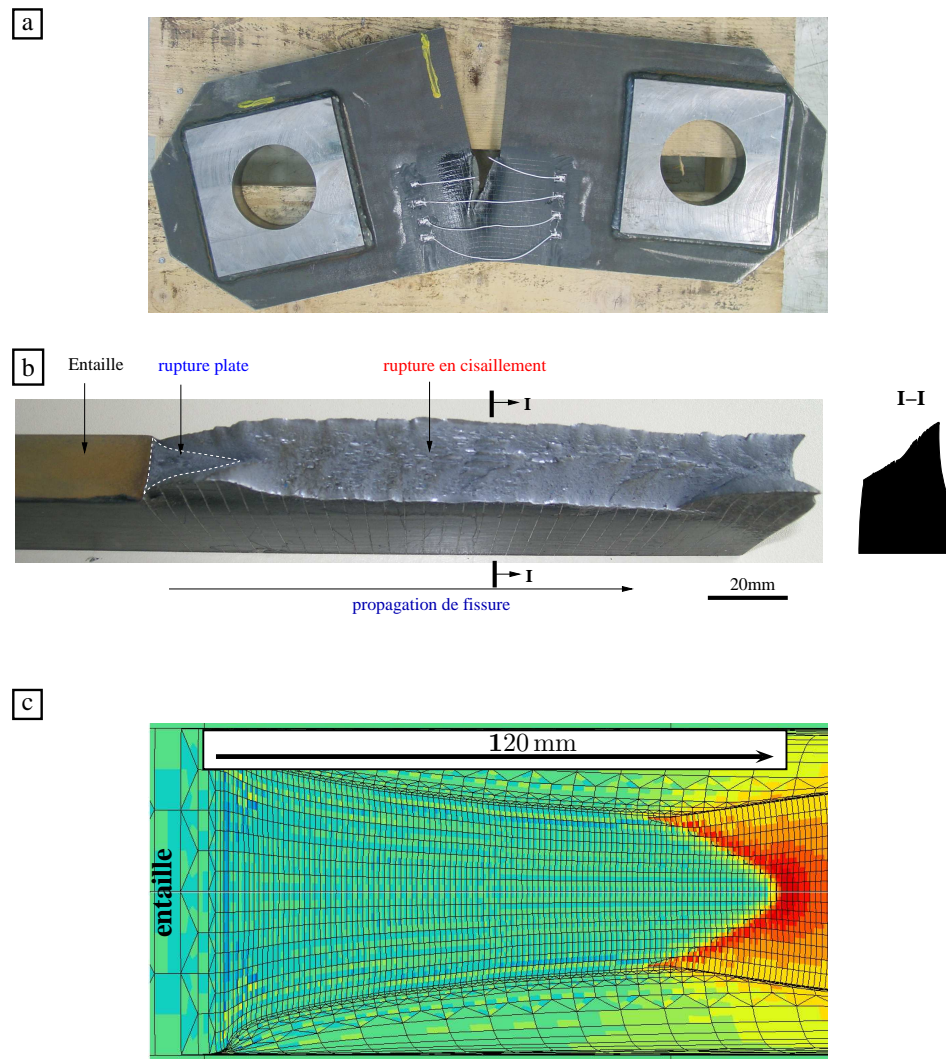


Figure 17: *Etude de la déchirure ductile dynamique de l'acier X100 (Luu, 2006)* : a) essai avec propagation de fissure interrompue sur éprouvette D3, b) faciès de rupture avec les différents modes de propagation : rupture plate et en cisaillement , c) simulation par éléments finis de la propagation ductile dynamique dans une éprouvette D3 (Luu et al., 2006b)*.*

la prise en compte des effets inertiels lors de l'analyse par éléments finis des éprouvettes Charpy et D3.

Dans le cadre de nos travaux sur la modélisation de la courbe de résilience et sur le passage résilience-ténacité pour un acier faiblement allié, nous avons utilisé le modèle de Rousselier, qui est le modèle de référence implanté dans les codes de calcul des centres R&D de l'industrie électronucléaire française (EDF, CEA). L'objectif de ces simulations était double : (i) prévoir l'énergie au palier ductile, (ii) obtenir une bonne description des champs mécaniques locaux afin de pouvoir prévoir le déclenchement du clivage dans la transition ductile-fragile.

Le modèle de Rousselier a été développé pour des matériaux ayant un comportement élasto-plastique. Son application aux matériaux avec un comportement élasto-visco-plastique a dû être étudiée. La simple introduction d'une dépendance à la vitesse de déformation plastique cumulée $\dot{\rho}$ de la contrainte

d'écoulement du matériau non endommagé $R(p)$ (eq. 11) comme proposé par Rousselier (Rousselier, 2001) conduit à une accélération de l'endommagement. Ce résultat est contraire à la réponse que nous avons obtenue à partir d'une analyse micro-mécanique et à partir d'essais mécaniques réalisés à différentes vitesses de sollicitation (Tanguy et al., 2002)*. L'incapacité du modèle de Rousselier standard à modéliser la déchirure ductile dans une éprouvette Charpy a également été reportée dans des travaux menés au CEA (Sainte Catherine et al., 2000; Sainte-Catherine et al., 2001). Nous avons donc étudié la possibilité de modifier le modèle de Rousselier standard afin de rendre correctement compte des effets de la vitesse de déformation sur la déchirure ductile.

Pour décrire correctement les effets de la vitesse de déformation et de la température dans le modèle de Rousselier, deux stratégies ont été étudiées.

La première a consisté à introduire une dépendance à la vitesse de déformation du paramètre $\sigma_1 = \sigma_1(\dot{p})$ (eq. 11). Cette solution a été retenue dans les travaux menés au CEA (Sainte-Catherine et al., 2001). Cette modification permet de modéliser la bonne cinétique de développement de la déchirure ductile au cours de l'essai Charpy. Son application est cependant assez lourde lorsque la structure modélisée subit des variations de vitesse de déformation et de température spatiales et temporelles.

Une seconde stratégie, que nous avons retenue et qui est détaillée dans (Tanguy et al., 2002)*, a reposé sur la définition d'une contrainte effective scalaire qui dépend de la porosité et du tenseur des contraintes macroscopiques de façon similaire au modèle GTN. La dépendance de la contrainte effective vis-à-vis du tenseur des contraintes macroscopiques induit celle à la vitesse de déformation et à la température. Cette solution amène à une dépendance de la porosité à la vitesse de déformation qui est (quasiment) nulle. Malgré un formalisme plus proche de celui du modèle GTN, elle permet de garder la particularité du modèle de Rousselier, à savoir une sensibilité au cisaillement plus marquée que celle du modèle GTN. Le modèle proposé a permis, dans l'étude de la déchirure ductile dans l'acier de cuve 16MND5(1), de reproduire les cinétiques expérimentales de propagation de la déchirure ductile dans les éprouvettes Charpy, pour des sollicitations quasi-statiques et dynamiques, et cela à différentes températures (cf l'article (Tanguy et al., 2005a) reporté à la fin de cette partie). La simulation proposée a également permis de reproduire correctement la courbure du front de la déchirure lors de la phase de propagation comme illustré sur la figure 18 où la forme de la déchirure simulée est comparée à la déchirure expérimentale.

Contrairement au modèle de Rousselier standard, le formalisme du modèle GTN ne montre pas de sensibilité de l'évolution de la porosité à la vitesse de déformation. Il a donc été utilisé tel quel pour simuler la propagation ductile dynamique au cours des essais D3 dans l'acier X100. Une éprouvette avec une longueur d'entaille de 80 mm, correspondant à la fissure initiale a été simulée. La figure 19 compare les résultats de cette simulation aux résultats expérimentaux. La figure 19a) présente l'évolution de la charge appliquée à l'éprouvette et de la longueur de la fissure en fonction du déplacement relatif des deux chapes d'amarrage. Sur cette figure, la propagation de la déchirure ductile correspond à la longueur actuelle de la fissure retranchée à la longueur initiale de la fissure (80 mm). La capacité de la modélisation à reproduire la cinétique de la déchirure ductile jusqu'à une longueur de fissure de l'ordre de 130 mm, soit une propagation de 50mm. Au delà la modélisation de la longueur de fissure sous-estime les mesures expérimentales. La figure 19b) présente l'évolution du taux de dissipation d'énergie, $R = \frac{dU_{diss}}{B.da}$, qui représente l'énergie consommée (dU_{diss}) par la propagation d'une fissure sur une distance da dans une éprouvette d'épaisseur B , en fonction de la longueur de la fissure. A nouveau, les résultats expérimentaux montrent que la simulation conduit à une surestimation du paramètre R lors de la propagation de la

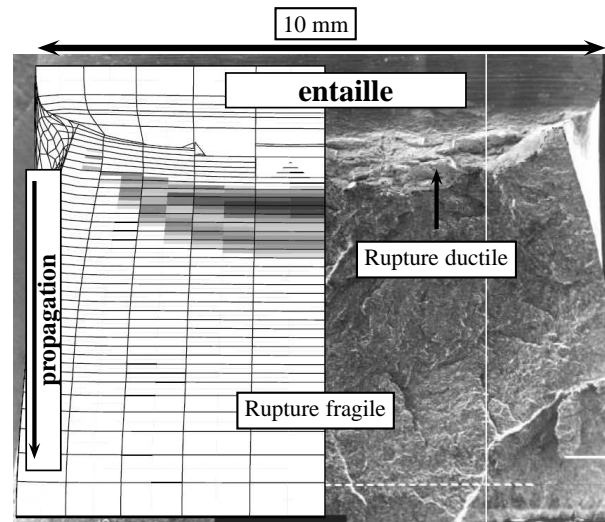


Figure 18: Comparaison entre les avancées ductiles modélisée avec le modèle de Rousselier modifié et expérimentale sur une éprouvette Charpy en acier 16MND5(1) (Tanguy, 2001). On visualise en avant de la déchirure ductile, en niveau de gris, la contrainte principale maximale qui contrôle le déclenchement du clivage.

déchirure ductile. L'écart observé entre la modélisation et les données expérimentales pour l'essai D3 peut avoir plusieurs origines : (i) la non-prise en compte des échauffements qui doivent se développer à la pointe de la fissure , (ii) la non-prise en compte du gradient de propriétés mécaniques à travers l'épaisseur de l'éprouvette D3, la tôle étant plus molle à coeur, (iii) la présence de nombreux délaminages qui ne sont pas reproduits par la simulation, (iv) bien que la modélisation permet de reproduire la forme courbée du front de fissure (fig. 17c), elle ne permet pas de reproduire la rupture en biseau observée expérimentalement pendant une grande partie de la phase de propagation.

III.6. Conclusions

A partir des travaux menés, la modélisation de la rupture complète par déchirure ductile de l'éprouvette Charpy a été réalisée sur l'acier 16MND5 et sur l'acier X100. La méthodologie développée, appliquée aux aciers, permet désormais, à partir de la description du comportement mécanique et des mécanismes de l'endommagement ductile, de prévoir numériquement les valeurs du plateau haut de la courbe de résilience.

Pour ce qui est de la simulation de la déchirure ductile dynamiques sur des grandes distances de propagation, le travail réalisé est une des premières tentatives pour palier à la problématique de la transférabilité entre éprouvettes de laboratoire et structure rencontrée par les corrélations empiriques actuellement utilisées. Les résultats obtenus ont en partie permis de répondre à cette problématique. Il est désormais possible à partir de modèles à bases micromécaniques, de simuler la propagation ductile sur une distance supérieure à la centaine de mm. Parions que l'augmentation continue des puissances de calcul devrait rapidement permettre d'atteindre une distance de l'ordre du mètre.

Une des principales perspectives de ce travail sur la modélisation de la rupture ductile sous sollicitation

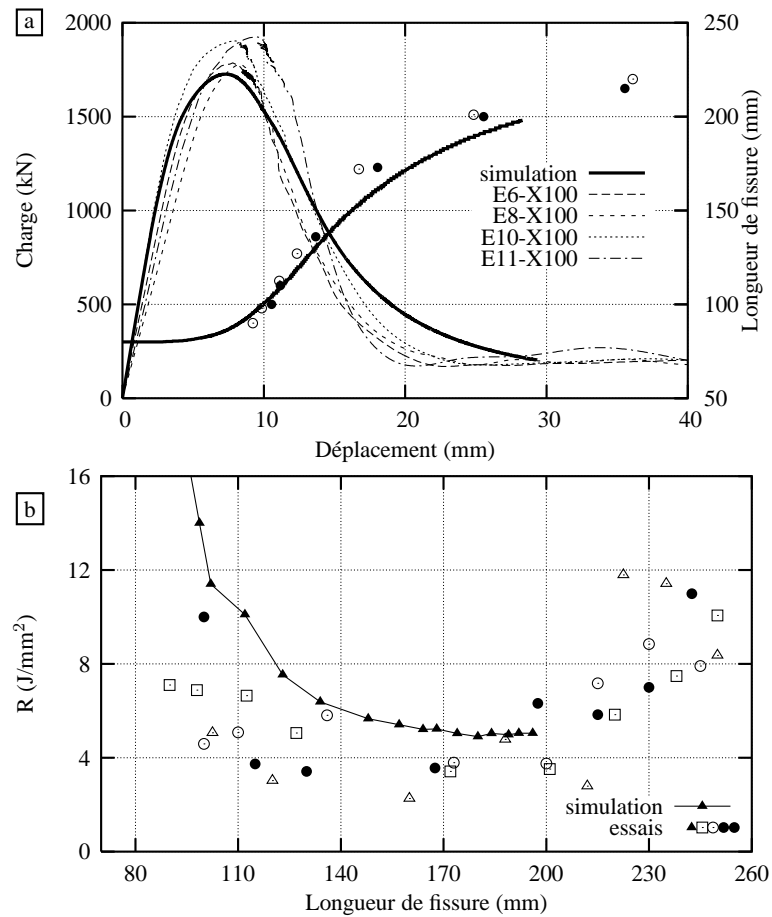


Figure 19: *Modélisation de la déchirure ductile dynamique à partir des essais D3 sur l'acier X100 (Luu, 2006; Luu et al., 2006b)*. Comparaisons expérience/simulation : a) Evolution de la charge et de la longueur de fissure en fonction du déplacement relatif des chapes d'amarrage de l'éprouvette , b) taux de dissipation d'énergie, R, en fonction de la longueur de fissure.*

rapide est la modélisation de la rupture ductile en biseau dans les structures. Les observations expérimentales montrent le rôle prépondérant de la seconde population de cavités dans ce mécanisme. L'introduction dans la modélisation d'une échelle de localisation propre à cette population est une voie que nous souhaitons explorer dans la poursuite de nos travaux sur la rupture ductile. Elle permettra d'aborder la modélisation de l'endommagement ductile des éprouvettes miniaturisées particulièrement utilisées dans les essais mécaniques sur matériaux irradiés. Par exemple, pour l'acier de cuve, la transférabilité des données entre les mini-éprouvettes de résilience et les éprouvettes standards reste une problématique ouverte.



An extension of the Rousselier model to viscoplastic temperature dependent materials

B. TANGUY and J. BESSON

Ecole des Mines de Paris, Centre des Matériaux, UMR CNRS 7633 BP 87, 91003 Evry Cedex, France

Received 4 April 2001; accepted in revised form 4 June 2002

Abstract. The Rousselier model has been used in the literature to model ductile failure of plastic materials. An extension of the Rousselier model to account for strain rate and temperature dependence is proposed in this work. The model is based on the definition of an effective scalar stress which depends on the porosity. Tests carried out on tensile round notched bars are used to validate the model after which it is applied to simulate the Charpy test.

Key words: Rousselier model; viscoplasticity, temperature, ductile rupture, Charpy test

1. Introduction

Models able to represent the strength and toughness of ductile materials have found increasing interest and application. The model proposed by Gurson (1977) is based on a micromechanical analysis of a void/matrix cell. It has been phenomenologically extended by Tvergaard and Needleman (1984) to better represent actual ductilities of metallic materials (so called GTN model). An approach based on continuum damage mechanics (CDM) and thermodynamics has also been proposed by Rousselier (1987) following the work of Lemaitre (1985). Both models modify the von Mises yield potential by introducing a single scalar damage quantity, namely the void volume fraction of cavities, f .

Although the GTN model has been most frequently used in the literature, the Rousselier model has also been used in several studies (Bilby *et al.*, 1992; Howard *et al.*, 1994; Li *et al.*, 1994; Eripret and Rousselier, 1994; Besson *et al.*, 2001b). Despite similarities, differences exist between the Rousselier and the GTN models: (i) Under pure shear, the Rousselier model predicts damage growth. (ii) Under pure hydrostatic tension, the Rousselier yield surface has a vertex which implies that the plastic deformation tensor always keeps a non-zero shear component. This characteristic leads to an easier formation of cup-cone fracture in absence of strain controlled damage nucleation (Besson *et al.*, 2001b). (iii) The way plastic hardening influences damage growth differs.

Both models were initially derived for plastic materials under isothermal conditions. However in situations such as shocks, machining or rapid crack growth, a wide range of strain rates are encountered so that viscoplastic effects should be accounted for. Adiabatic temperature raise may also take place under similar conditions. It is therefore important to extend models for ductile rupture to viscoplastic temperature dependent materials.

The extension of the Gurson model has been proposed in (Needleman and Tvergaard, 1991). The aim of this study, is to propose a similar extension in the case of the Rousselier model. The formulation of the original model is recalled in section 2; it is then shown that a straightforward extension does not result in predictions in agreement with unit cell calcu-

PDF-OUTPUT

TYPESET Gr.: 201028427, FRAC 5135 (frackap:engifam) v.1.1
f5093708.tex; 2/07/2002; 13:32; p.1

lations and with the extended Gurson model (section 2.2). An extension consistent with unit cell calculations is proposed in section 3. To validate the model, tensile round notched bars were tested at different loading velocities (section 4) ; it is shown that increasing the loading speed slightly increases the ductility which is consistent with the prediction of the new model. Finally, the model is applied to simulate the Charpy test under dynamic conditions (section 5).

2. The Rousselier model

2.1. THE ORIGINAL ROUSSELIER MODEL

Based on thermodynamic considerations, following the work of Lemaitre and Chaboche (1985), Rousselier (1987) derived a set of constitutive equations to model the behavior and rupture of porous materials. The model introduces two state variables to describe the material: p the cumulated plastic strain and f the damage which corresponds, in this case, to the void volume fraction (i.e. porosity). The yield surface is given by:

$$\Phi = \frac{\sigma_{\text{eq}}}{1-f} + fD\sigma_1 \exp\left(\frac{\sigma_{kk}}{3(1-f)\sigma_1}\right) - R = 0 \quad (1)$$

where σ_{eq} is the von Mises equivalent stress and σ_{kk} the trace (tr) of the stress tensor $\underline{\sigma}$. R is the yield stress of the undamaged material and is expressed as a function of p . D and σ_1 are model coefficients which are related to damage growth. The recommended values (Rousselier, 1987) are $D \approx 2$ and $\sigma_1 \approx \frac{1}{3}(R_e + R_m)$ where R_m is the ultimate engineering stress and R_e the yield stress.

An additive decomposition of the strain rate tensor $\dot{\epsilon}$ is assumed so that:

$$\dot{\epsilon} = \dot{\epsilon}_e + \dot{\epsilon}_p \quad (2)$$

The elastic strain $\dot{\epsilon}_e$ is related to the stress tensor by: $\dot{\epsilon}_e = \underline{\underline{C}} : \dot{\sigma}$. As the void volume fraction is usually small, the elasticity tensor $\underline{\underline{C}}$ is assumed to be constant. The irreversible plastic deformation rate $\dot{\epsilon}_p$ is obtained assuming the normality rule, so that:

$$\dot{\epsilon}_p = (1-f)\dot{p} \frac{\partial \Phi}{\partial \underline{\sigma}} = \dot{p} \left[\frac{3}{2} \frac{\underline{\underline{s}}}{\sigma_{\text{eq}}} + \frac{fD}{3} \exp\left(\frac{\sigma_{kk}}{3(1-f)\sigma_1}\right) \underline{\underline{1}} \right] \quad (3)$$

where $\underline{\underline{1}}$ is the unit second order tensor and $\underline{\underline{s}}$ the stress deviator. The evolution of the porosity is given by mags conservation:

$$\dot{f} = (1-f)\text{tr}\dot{\epsilon}_p = (1-f)\dot{p}fD \exp\left(\frac{\sigma_{kk}}{3(1-f)\sigma_1}\right). \quad (4)$$

It can be noted that porosity always increases even for stress states corresponding to compression (i.e. $\text{tr}\underline{\sigma} < 0$). The plastic rate \dot{p} is found from the consistency condition $\dot{\Phi} = 0$, $\Phi = 0$. It directly follows from 3 that \dot{p} corresponds to the usual von Mises strain rate given by $\dot{p} = \sqrt{\frac{2}{3}} \dot{\underline{\underline{\epsilon}}}_p : \dot{\underline{\underline{\epsilon}}}_p$ where $\dot{\underline{\underline{\epsilon}}}_p$ is the deviator of $\dot{\underline{\underline{\epsilon}}}_p$.

An extension of the Rousselier model to viscoplastic temperature dependent materials 3

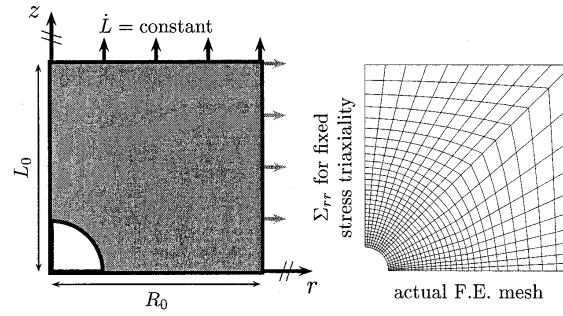


Figure 1. Geometry and loading conditions of the unit cells and Finite Element mesh.

2.2. A FIRST STRAIGHTFORWARD EXTENSION AND COMPARISON WITH UNIT CELL CALCULATIONS

The model can be extended to the case of viscoplastic material, considering that the yield limit R depends on both p and \dot{p} as proposed in (Rousselier, 2001). In that case, equation 1 is still valid and the model follows the same formulation as in section 2.

The trends obtained with this modified model can be compared with unit cell calculations in which the porous material is represented by a cylinder containing an initially spherical void (Koplik and Needleman, 1988; Brocks *et al.*, 1995). The matrix behavior is assumed isotropic (von Mises plasticity) with a hardening law given by:

$$R(P, \dot{p}) = k(p + \varepsilon_0)^n + K \dot{p}^{\frac{1}{N}}. \quad (5)$$

In the previous equation, the hardening effects of plastic strain and plastic strain rate are assumed to be additive. The following numerical values for the different parameters will be used in the following: $k = 800$ MPa, $n = 0.1$, $\varepsilon_0 = 0.002$, $K = 50$ MPa $s^{-1/N}$ and $N = 5$. This corresponds to a strengthening effect of the deformation rate which will always be assumed in the following.

The unit cell geometry and loading conditions are represented on Figure 1. The cell dimensions (L : height, R : radius) are assumed to be initially equal $L_0 = R_0$. The initial void volume fraction is equal to 0.001. The cell is loaded at a constant displacement rate in the axial direction (\dot{L}) and the radial pressure Σ_{rr} is controlled to keep a constant stress triaxiality ratio. Noting that the overall loading is axisymmetric, the macroscopic stress tensor is given by

$$\underline{\Sigma} = \begin{pmatrix} \Sigma_{rr} & 0 & 0 \\ 0 & \Sigma_{rr} & 0 \\ 0 & 0 & \Sigma_{zz} \end{pmatrix} \quad (6)$$

In the following, Σ_{rr} is controlled in such a way that: $\Sigma_{zz} > \Sigma_{rr}$ so that the macroscopic stress triaxiality ratio is given by:

$$\tau = \frac{1}{3} \frac{\Sigma_{zz} + 2\Sigma_{rr}}{\Sigma_{zz} - \Sigma_{rr}} \quad (7)$$

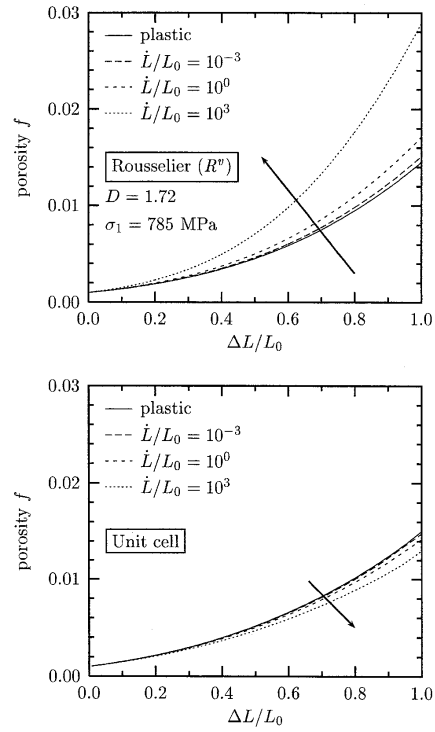
4 *D. Tanguy and J. Besson*

Figure 2. Comparison of porosity evolutions obtained with the Rousselier model and unit cell calculations for different strain rates under a constant stress triaxiality ratio $\tau = 1.0$. Arrows indicate the effect of an increasing deformation rate.

Unit cell calculations were performed for $\tau = 1$ for a rate independent matrix ($K = 0$) and for different strain rates $\dot{L}/L_0 = 10^{-3}, 10^0, 10^{+3}$ (s^{-1}). Results are shown in Figure 2. In the case of unit cell calculations the porosity growth rate is slightly reduced with increasing deformation rate. The opposite effect is obtained using the Rousselier model (Figure 2) with leads to a strong increase of the void growth rate with increasing straining rate. The Rousselier model was fitted to the unit cell simulation for a rate independent behavior. In the case of the Rousselier model, the increase of the deformation rate leads to an increase of the stresses and in particular of σ_{kk} . As σ_1 is considered as constant, the ratio σ_{kk}/σ_1 increases thus inducing an acceleration of the porosity growth rate (Equation (4)). The unit cell calculations indicate that this trend does not correspond to any physical situation. Similar undesirable effects are observed in the case where the hardening behavior is temperature dependent if σ_1 is supposed to remain constant. This indicates that σ_1 should be defined as both temperature and strain

An extension of the Rousselier model to viscoplastic temperature dependent materials 5

rate dependent (Sainte Catherine *et al.*, 2001). This solution is however quite complex as the dependence should be determined. In the following, an approach based on the definition of an effective scalar stress is proposed.

3. Proposed extension of the Rousselier model

3.1. PROPOSED EXTENSION

The proposed extension relies on the definition of an effective scalar stress which is a function of both the macroscopic stress tensor $\underline{\sigma}$ and the porosity. This approach was first used in the case of the Green elliptic model (Green, 1972) and used for instance to model the hot compaction of metallic (Abouaf *et al.*, 1988) or ceramic powders (Besson and Abouaf, 1992). The same material description was also applied to extend the Gurson model to viscoplastic materials (Rivalin *et al.*, 2001; Besson *et al.*, 2001b).

In the case of the extension of the Rousselier model, the effective stress σ_* is implicitly defined by the following equation:

$$\psi = \frac{\sigma_{\text{eq}}}{(1-f)\sigma_*} + \frac{2}{3}fD_R \exp\left(\frac{q_R}{2} \frac{\sigma_{\text{kk}}}{(1-f)\sigma_*}\right) - 1 \stackrel{\text{def. } \sigma_*}{=} 0. \quad (8)$$

D_R and q_R are two new model parameters. σ_* can also be expressed as:

$$\sigma_* = \frac{q_R \sigma_{\text{eq}}}{(1-f) \left(q_R - \frac{2}{3\tau} L_w \left(q_R D_R f \tau \exp\left(\frac{3}{2} q_R \tau\right) \right) \right)} \quad (9)$$

where L_w is the function such that $L_w(x) \exp(L_w(x)) = x$ and τ the stress triaxiality ratio. In particular, σ_* becomes 0 as $\underline{\sigma} \rightarrow \underline{\mathbf{0}}$. σ_* , which incorporates the effects of both shear and hydrostatic stresses, is interpreted as a measure of the stresses in the matrix material which surrounds the pores. The plastic (or viscoplastic) flow potential ϕ is then written as:

$$\phi = \sigma_* - R. \quad (10)$$

In this case, R represent the isotropic plastic hardening of the undamaged material and depends on the cumulated plastic strain p but not on \dot{p} . It might also be temperature dependent. The plastic strain rate tensor is still given by the normality rule as:

$$\dot{\underline{\epsilon}}_p = (1-f)\dot{p} \frac{\partial \phi}{\partial \underline{\sigma}} = (1-f)\dot{p} \frac{\partial \sigma_*}{\partial \underline{\sigma}}. \quad (11)$$

The consistency condition $\phi = 0, \dot{\phi} = 0$ is then used to compute \dot{p} in the plastic case. In the viscoplastic case, \dot{p} is obtained using the viscous flow law of the dense material expressed as:

$$\dot{p} = F(\sigma_* - R). \quad (12)$$

where F is the viscoplastic flow law. It can also be shown that:

$$\frac{\partial \sigma_*}{\partial \underline{\sigma}} : \underline{\sigma} = \sigma_* \quad (13)$$

6 *D. Tanguy and J. Besson*

and that consequently

$$\dot{\underline{\epsilon}}_p : \underline{\sigma} = (1 - f) \dot{p} \sigma_* \quad (14)$$

$\dot{\underline{\epsilon}}_p : \underline{\sigma}$ represents the macroscopic plastic dissipation which is equal to the microscopic dissipation ($\dot{p} \sigma_*$) times the volume fraction actually occupied by the matrix material (e.g. $1 - f$). p is therefore interpreted as an effective strain of the matrix material. The definition of p therefore differs from the definition proposed in the original model but coincides with the GTN model.

In the case of rate independent materials, the original and extended Rousselier are not equivalent unless both D_R and q_R are expressed as function of R . Noting that $\sigma_* = R$ in this case, both models are identical if:

$$D_R \equiv \frac{3}{2} D \frac{\sigma_1}{R} \quad \text{and} \quad q_R \equiv \frac{2}{3} \frac{R}{\sigma_1} \quad (15)$$

This suggests that D_R and q_R could be written as:

$$D_R = D_R^0 \frac{R(0, \alpha_i)}{R(p, \alpha_i)} \quad \text{and} \quad q_R = q_R^0 \frac{R(p, \alpha_i)}{R(0, \alpha_i)} \quad (16)$$

where α_i represents other parameters, such as temperature, on which R might depend. D_R^0 and q_R^0 are then supposed to be constant.

In the following the straightforward extension of the original Rousselier model will be referred to as R^v , the modified model with constant D_R and q_R as R^m and the modified model with D_R and q_R given by Equation (16) as R^M .

3.2. FAILURE

As failure occurs the stress tensor becomes zero; however the effective stress σ_* must remain non null (in fact greater than R) in order to get plastic deformation. Expressing ψ for $\sigma_{\text{eq}} = 0$ and $\sigma_{\text{kk}} = 0$, a non zero value for σ_* is obtained only if $2f D_R/3 = 1$. It can be concluded that the failure f_F porosity is equal to $f_F = 3/(2D_R)$. In addition as f_F is always smaller than 1, D_R must be larger than 3/2. In the original Rousselier model, failure is always obtained for $f = 1$. In practice, one might consider that the material rapidly losses any mechanical strength as f reaches a critical value f_c (Kusssmaul *et al.*, 1993). Above this value, the material is considered as broken.

3.3. REMARKS

3.3.1. Comparison with unit cell simulations

The evolution of the porosity (R^m model) as a function of the elongation for a fixed stress triaxiality ratio is shown on Figure 3. For a given elongation, a very small apparent decrease of the porosity is observed for increasing deformation rates (see detail on Figure 3) which is due to an increase of the elastic part of the deformation caused by the higher stresses. However this decrease is negligible compared to the porosity growth rate variation observed on unit cell calculations (Figure 2). Similar results are obtained with the R^M model.

An extension of the Rousselier model to viscoplastic temperature dependent materials 7

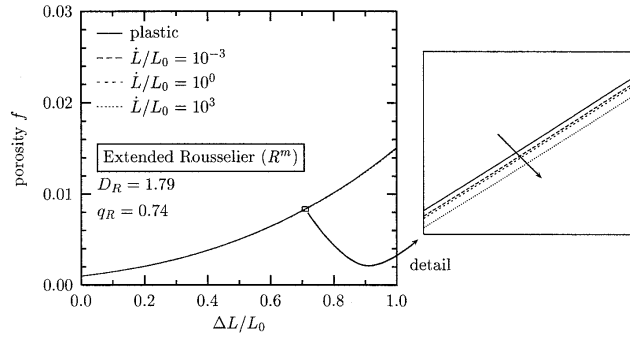


Figure 3. Evolution of the porosity obtained with the modified Rousselier model (R^m) for different strain rates under a constant stress triaxiality ratio $\tau = 1.0$. Arrows indicate the effect of an increasing deformation rate.

3.3.2. Comparison of the extensions with the Gurson and Rousselier models

The Gurson model (referred to as G in the following) which is widely used in the literature can also be expressed based on the definition of an effective stress (Grange *et al.*, 2000). Its definition is also implicit and is given by:

$$\psi = \frac{\sigma_{eq}^2}{\sigma_*^2} + 2q_1 f \cosh\left(\frac{q_2}{2} \frac{\sigma_{kk}^2}{\sigma_*^2}\right) - 1 - q_1^2 f^2 \stackrel{\text{def}}{=} \sigma_* \quad (17)$$

Starting from this definition, Equations (10) to (14) remain valid. As in the case of the R^m and R^M models, the function ψ is expressed as a function of the ratios σ_{eq}^2/σ_*^2 and σ_{kk}^2/σ_*^2 so that any undesirable strain rate dependence is avoided. Indeed, the slight decrease of the damage growth rate observed on unit cell calculations (Figure 2) is also not observed.

The R^m model deals with viscosity and plastic hardening as the G model but keeps the specific shape of the Rousselier yield surface (i.e. damage growth under pure shear, vertex under pure pressure).

The R^M model deals with viscosity as the G model and with plastic hardening as the R^v model. It also retains the specificity of the yield surface.

The proposed extensions of the Rousselier model allow to handle strain rate and temperature dependent material in a much better way than the original model. It does however not allow to represent the slight strain rate dependence observed on unit cell calculations. With respect to this particular point, the Gurson model behaves in a similar way.

4. Application: notched bars

4.1. NUMERICAL PROCEDURES

Finite element simulations were performed using the FE software Zébulon (Besson and Foecherch, 1997). Finite strains were treated using corotational reference frames (Ladevèze, 1980). A fully implicit integration scheme is used to integrate the material constitutive equations which allows the calculation of the consistent tangent matrix (Simo and Taylor, 1985). The

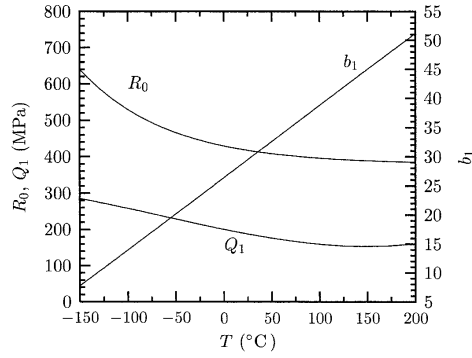


Figure 4. Variation of plastic hardening parameters R_0 , Q_1 and b_1 with temperature.

method is detailed in (Besson *et al.*, 2001b). When the material is considered as broken: its behavior is replaced by an elastic behavior with a very low stiffness (Young's modulus: $E_b = 1$ MPa). A similar technique was used in (Liu *et al.*, 1994) showing convergence of the results for sufficiently low values of the Young's modulus E_b . Gauss points where these conditions are met are referred to as 'broken Gauss points'. In regions where damage develops 8 nodes square (resp. 20 nodes bricks) elements were used for axisymmetric (resp. 3D) simulations with reduced integration (i.e.: 4 Gauss points in the axisymmetric case and 8 Gauss points in the 3D case). Elements containing more than a given number of broken Gauss points (axisymmetric case: 2, 3D case: 4) are automatically removed by checking this condition after each time increment.

4.2. MATERIAL AND MODEL PARAMETERS

This study was performed on A508 (16MND5) steel ($C = 0.16$, $Mn = 1.33$, $Ni = 0.76$, $Mo = 0.51$) which is used in the French pressurized water nuclear reactors. The material contains small round MnS inclusions at which ductile damage is initiated. The MnS volume fraction is equal to 1.75×10^{-4} ; it will be assumed that the interface between the inclusions and the matrix fails for small plastic strain so that the MnS volume fraction can be considered as the initial porosity f_0 .

The plastic behavior of this type of material depends both on strain rate and temperature. The material behavior was tested for temperature varying from -150°C to 200°C . Tests were performed on tensile bars using a servohydraulic machine. In all case, damage growth can be neglected so that $\sigma_* \simeq \sigma_{eq}$. The yield stress R is assumed to be a function of both p and the temperature T . It was fitted as:

$$R(p, T) = R_0 + Q_1(1 - \exp(-b_1 p)) + Q_2(1 - \exp(-b_2 p)) \quad (18)$$

Parameters R_0 , Q_1 and b_1 are functions of the temperature shown on Figure 4. Q_2 and b_2 are constant with: $Q_2 = 452$ MPa, $b_2 = 1.72$ (Tanguy *et al.*, 2000).

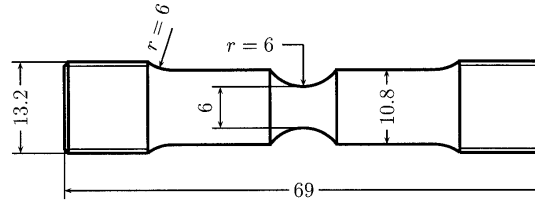
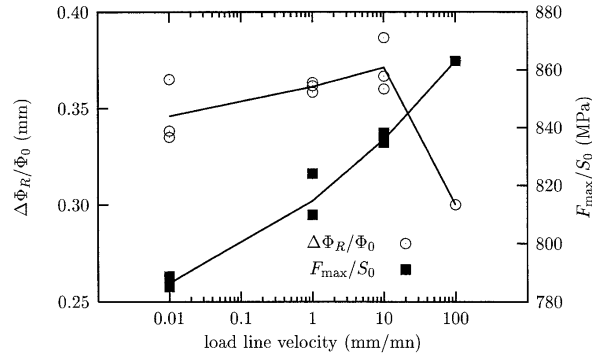


Figure 5. Notched axisymmetric test specimen.

Figure 6. Effect of the load line velocity on the notched diameter reduction at failure ($\Delta\Phi_R/\Phi_0$) and the maximum normalized load (F_{max}/S_0).

4.3. EXPERIMENTAL EVIDENCE OF VISCOPLASTICITY EFFECTS

Axisymmetric notched bars shown on Figure 5 were tested using increasing load line velocities (v_{LL}) between 0.01 and 100 mm mn⁻¹ at a temperature equal to -30 °C. The minimum diameter variation $\Delta\Phi$ was continuously recorded during the tests. Results are displayed on Figure 6. It is shown that the normalized maximum force F_{max}/S_0 (F : force, S_0 : initial minimum cross section, Φ_0 : initial minimum diameter) is an increasing function of the load line velocities. The diameter variation at the onset of failure $\Delta\Phi_R$ (corresponding to a sharp drop of the load and to the initiation of a macro crack at the center of the notch) increases for velocities up to 10 mm mn⁻¹; a strong decrease is observed for $v_{LL} = 100$ mm mn⁻¹ which is interpreted as an effect of material heating. To estimate the elevation of temperature, a thermocouple was welded in the notch at about 2 mm from the minimum cross section. Measurements confirm that no significant temperature elevation is observed up to $v_{LL} = 10$ mm mn⁻¹ whereas a temperature increase of 50 °C was measured for $v_{LL} = 100$ mm mn⁻¹.

Three tests were performed for velocities equal to 0.01, 1 and 10 mm mn⁻¹ resulting in somewhat dispersed values for $\Delta\Phi_R$. This dispersion has been studied on a very similar steel by Decamp *et al.* (1998) and was related to clusters of MnS inclusions; similar effects are to be expected in the present case. In the following average values will only be considered.

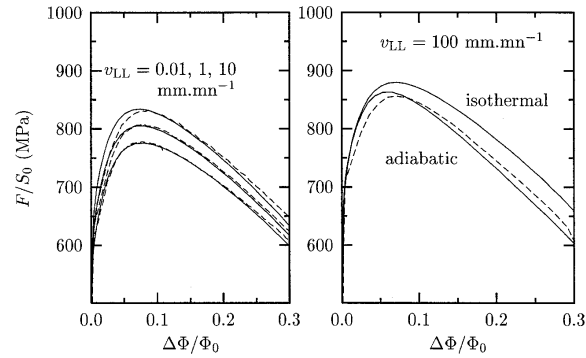


Figure 7. Comparison of the experimental (dashed lines) and simulated (solid lines) force-reduction of diameter curves for different load line velocities.

The viscoplastic behavior of the material was adjusted to represent the experimentally observed maximum forces. A simple Norton law was used so that:

$$\dot{p} = \left\langle \frac{\sigma_* - R(p, T)}{K} \right\rangle^n \quad (19)$$

with $K = 55 \text{ MPa s}^{-1/n}$ and $n = 5$. Results are shown on Figure 7 for $\Delta\Phi/\Phi_0 < 0.3$. As damage remains limited, the different models give the same results. For $v_{LL} = 100 \text{ mm}^{-1}$ two calculations were performed assuming either isothermal conditions or adiabatic conditions. It is shown that the experiment lies closer to the adiabatic solution. Under adiabatic conditions, the temperature changes are related to the plastic work by:

$$C_p \dot{T} = \beta \underline{\sigma} : \dot{\underline{\epsilon}}_p \quad (20)$$

where C_p is the heat capacity of the material ($C_p = 3.12 \text{ MPa K}^{-1}$) and $\beta = 0.9$.

4.4. SIMULATION OF NOTCHED BARS

Each of the four damage models has two coefficients which need to be adjusted. In this section, one parameter was fixed and the other one was adjusted to match the average diameter reduction at the onset of failure for $v_{LL} = 0.01 \text{ mm mn}^{-1}$. These coefficients are given in Table 1. The relatively high value for D_R^0 (R^M model) was selected so that D_R (Equations (16)) remains always larger than $3/2$.

Figure 8 shows the evolution of the normalized force F/S_0 as a function of the diameter variation for all models and different load line velocities. The rapid drop of the load corresponds to the initiation of a crack at the center of the notch (Figure 9). It is seen that increasing the loading rate has very little effect on the diameter variation at the onset of failure in the case of the R^V model whereas a clear increase of ductility is observed in the case of the R^m , R^M and G models. For $v_{LL} = 100 \text{ mm mn}^{-1}$, the difference between the isothermal and adiabatic calculations is much larger for the R^m , R^M and G models than for the R^V model.

An extension of the Rousselier model to viscoplastic temperature dependent materials 11

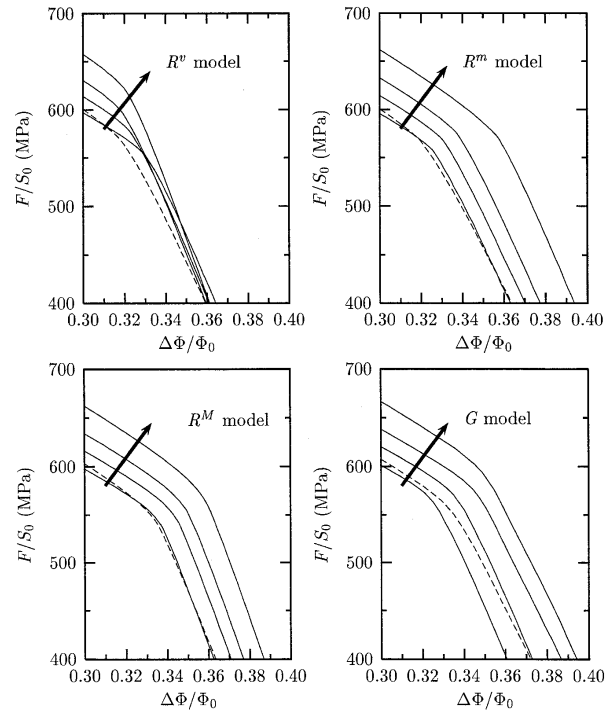


Figure 8. Force-reduction of diameter curves for the R^v , R^m , R^M and G models for different load line velocities ($v_{LL} = 0.01, 1, 10$ and 100 mm mn^{-1}). The arrows indicate increasing velocities. Solid lines represent isothermal calculations and dashed lines adiabatic calculations for $v_{LL} = 100 \text{ mm mn}^{-1}$. The rapid load drop corresponds to the initiation of a crack at the center of the notch.

Table 1. Damage coefficients used for the simulation of the notched bar.

| model | fixed coef. | adjusted coef. |
|-------|----------------|------------------------------|
| R^v | $D = 2$ | $\sigma_1 = 720 \text{ MPa}$ |
| R^m | $D_R = 2$ | $q_R = 0.92$ |
| R^M | $D_R^0 = 3.72$ | $q_R^0 = 0.51$ |
| G | $q_1 = 1.5$ | $q_2 = 1.2$ |

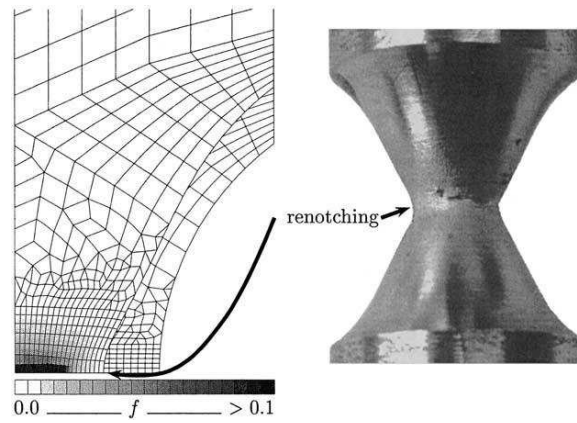


Figure 9. Damage growth in the notch (R^m model). Comparison of the deformed mesh with the original mesh showing the renotching of the bar which is experimentally observed.

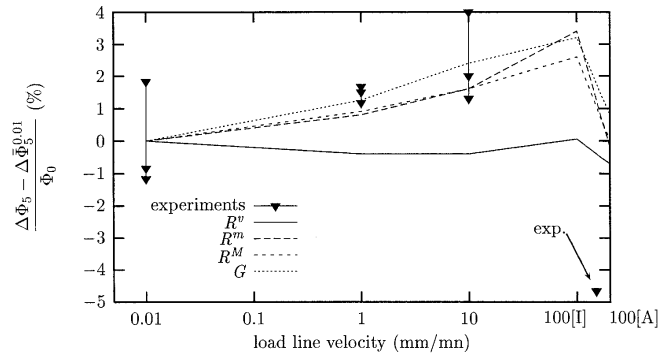


Figure 10. Effect of the load line velocity on the diameter variation for $F/S_0 = 500$ MPa: comparison of experiments and numerical results for the 4 different models (100[I]: $v_{LL} = 100$ mm mn^{-1} computed using isothermal conditions, 100[A]: $v_{LL} = 100$ mm mn^{-1} computed using adiabatic conditions).

An example of damage growth in the notch (R^m model) is shown on Figure 9. The comparison of the deformed mesh with the original mesh shows the renotching of the bar which is experimentally observed.

The diameter reduction for $F/S_0 = 500$ MPa after the onset of failure, denoted $\Delta\Phi_5$ in the following, was determined for both simulations and experiments. The effect of the loading

rate on ductility is quantified by the ratio:

$$\eta_v = \frac{\Delta\Phi_5 - \Delta\Phi_5^{0.01}}{\Phi_0} \quad (21)$$

where $\Delta\Phi_5^{0.01}$ is the value of $\Delta\Phi_5$ for $v_{LL} = 0.01 \text{ mm mn}^{-1}$. Experimental and simulated values for η_v are displayed on Figure 10. Despite the experimental dispersion, a good comparison is obtained for R^m , R^M and G models up to $v_{LL} = 10 \text{ mm mn}^{-1}$ (i.e. isothermal conditions). The slight differences between these models are not significant. As expected, the R^v model underestimates the experimentally observed effects. Moreover it predicts a slightly decreasing ductility with increasing loading rate. For $v_{LL} = 100 \text{ mm mn}^{-1}$ a decrease of the ductility is obtained for adiabatic conditions. It underestimates the experimentally observed value (although only one experimental data point is available). The ductility reduction between isothermal and adiabatic conditions for the R^v model remains much smaller than for the three other models. This clearly does not agree with the experimental results.

4.5. STABILITY ANALYSIS

Failure is preceded by the localization of strain and damage in narrow bands. This situation has been studied in the case of elastoplastic materials (Rice, 1976; Rice and Rudnicki, 1980). The condition for localization in a band of normal $\bar{\mathbf{n}}$ is written as:

$$\det \bar{\mathbf{n}} \underline{\underline{\mathbf{L}}} \bar{\mathbf{n}} = 0 \quad (22)$$

where $\underline{\underline{\mathbf{L}}}$ is the elastoplastic tangent operator used to express the incremental constitutive equation as:

$$\underline{\underline{\dot{\sigma}}} = \underline{\underline{\mathbf{L}}} : \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}} \quad (23)$$

A localization indicator (I_L) can be derived from the previous condition as $I_L = \min_{\bar{\mathbf{n}}} \det \bar{\mathbf{n}} \underline{\underline{\mathbf{L}}} \bar{\mathbf{n}}$. When I_L becomes negative, localization can possibly occur.

The previous analysis is however limited to elastoplastic materials (i.e. materials for which a linearized relationship can be defined between $\underline{\underline{\dot{\sigma}}}$ and $\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}$). In the case of elastoviscoplastic materials, Rice's analysis cannot be used. In this case, several methods have been proposed. The linear perturbation analysis has been first used in the literature (Fressengeas and Molinari, 1985; Anand *et al.*, 1987; Rousselier, 1991; Barbier *et al.*, 1998). More recently, it has been proposed to use a localization condition similar to Equation (22) in which the tangent operator $\underline{\underline{\mathbf{L}}}$ is replaced by an algorithmic viscoplastic tangent operator related to the numerical integration scheme (Carosio *et al.*, 2000; Besson *et al.*, 2001b). In Besson *et al.* (2001b) the tangent matrix $\underline{\underline{\mathbf{D}}}$ consistent with a fully implicit integration scheme (Simo and Taylor, 1985) was used. $\underline{\underline{\mathbf{D}}}$ is such that: $\delta \Delta \underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{\mathbf{D}}} : \delta \Delta \underline{\underline{\varepsilon}}$ where $\delta \Delta \underline{\underline{\sigma}}$ and $\delta \Delta \underline{\underline{\varepsilon}}$ are respectively the stress and strain increment over a finite time step. δ denotes an infinitesimal variation. Following Rice's methodology, the condition for localization in a band of normal $\bar{\mathbf{n}}$ can be written in the case of a viscoplastic material as $\det \bar{\mathbf{n}} \underline{\underline{\mathbf{D}}} \bar{\mathbf{n}} = 0$. A localization indicator (I_D) can also be derived as: $I_D = \min_{\bar{\mathbf{n}}} \det \bar{\mathbf{n}} \underline{\underline{\mathbf{D}}} \bar{\mathbf{n}}$; $I_D < 0$ indicates the possibility of localization. Details of the calculation of $\underline{\underline{\mathbf{D}}}$ and the minimization procedure used to compute I_D are given in Besson *et al.* (2001b).

In the following, the normalized value of the localization indicator is used: I_D/D_e with D_e being the determinant of the elastic acoustic tensor ($D_e = \det \bar{\mathbf{n}} \underline{\underline{\mathbf{C}}} \bar{\mathbf{n}}$). In Figure 11,

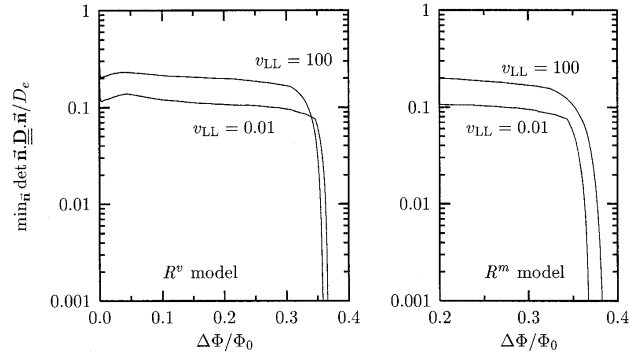


Figure 11. Evolution of the normalized viscoplastic localization indicator for models R^v and R^m for two different load line velocities.

the evolution of I_D/D_e at the center of the notch (i.e. the location of first bifurcation) is plotted as a function of the diameter reduction for the R^v and R^m models for $v_{LL} = 0.01$ and $v_{LL} = 100 \text{ mm mn}^{-1}$. In the range where damage remains small ($\Delta\Phi_0 < 0.3$), results for both models are similar. It is observed that I_D for $v_{LL} = 0.01$ is smaller than I_D for $v_{LL} = 100 \text{ mm mn}^{-1}$ which simply illustrates the stabilizing effect of increasing strain rate for viscoplastic materials. The onset of localization ($I_D = 0$) predicted by the analysis are consistent with the results shown on Figure 8. In the case of the R^m model localization is delayed due to viscous effects. In the case of the R^v model there is a competition between the stabilizing effect of strain rate and the increased damage rate. The analysis carried out with the G and R^M models leads to the same results as for the R^m model.

5. Application: Charpy specimens

Charpy V-notch tests are common tests that are used to measure the fracture toughness of materials. The notched bar is subjected to an impact with a striker moving at about 5 ms^{-1} . In the ductile regime, inertial effects can be neglected (Tvergaard and Needleman, 1988; Sainte Catherine *et al.*, 2001) but the variations of flow strength with temperature and strain rate play an important role on energy dissipation (Mathur *et al.*, 1994). In the following, simulations of the Charpy tests carried out using the R^v and R^m models will be compared. Charpy V-notch specimens were tested using an instrumented Charpy testing device at -60°C . Full details of the experiments are reported in Tanguy (2001). Specimens were machined and tested according to the AFNOR90 standard (AFNOR, 1990).

5.1. SIMULATION

Simulations were carried out with material parameters fitted to represent the ductility of round bars having different notch severity. On the one hand, this results in slightly different parameters than those used in section 4 and a representation of the ductility of the notched specimens depicted on Figure 5 which is not as accurate. On the other hand, the decrease of ductility as

An extension of the Rousselier model to viscoplastic temperature dependent materials 15

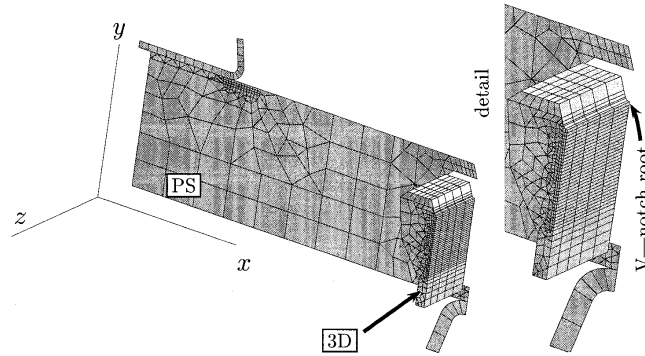


Figure 12. FE mesh, used for the simulation of the Charpy specimens.

a function of the notch severity is better described. The following parameters were used: R^v model: $D = 2.2$, $\sigma_1 = 669$ MPa, R^m model: $D = 2.2$, $q_R = 0.92$, R^M model: $D_R^0 = 2.0$, $q_R^0 = 0.64$.

Examinations of polished cross sections of the specimens have also shown that a second population of voids is nucleated at iron carbides (Fe_3C) at large strains. This was accounted for by modifying Equation (4) according to the phenomenological strain controlled nucleation laws proposed in Chu and Needleman (1980):

$$\dot{f} = (1 - f)\text{tr}\dot{\epsilon}_p + A_n \dot{p} \quad (24)$$

where A_n is a new material parameter. A_n was not numerically adjusted but estimated from microstructural examinations: (i) nucleation starts from plastic strains larger than 0.5, (ii) only a fraction of the carbides eventually breaks before final failure. Assuming that only $\frac{1}{4}$ of the carbides break, A_n was taken equal to 0.01 for $0.5 \leq p \leq 1.1$ and $A_n = 0$ otherwise. $p = 1.1$ corresponds to a very high strain level which is reached only at locations where failure occurs. The total amount of porosity nucleated at carbides is equal to 0.6%. It was found that accounting for nucleation is important to model crack advance at the outer free surface of the specimen. Without nucleation, crack advance is strongly inhibited at this location where the stress triaxiality ratio is low. Note however that the actual fracture pattern in this region corresponds to shear lips (Figure 14) which are not appropriately modeled in the present study.

The finite element mesh used to model the test is shown on Figure 12. Due to symmetries, only one quarter of the specimen is meshed with the usual boundary conditions. A mixed 2D/3D mesh is used to reduce the number of degrees of freedom. The 2D part is computed assuming plane stress (PS) conditions. Such a technique was also used to model Charpy specimens by Schmitt *et al.* (1997). Contact between the striker, the anvil and the specimen is also accounted for using a friction coefficient equal to 0.1. Simulations were carried out with a constant striker speed of 5 ms^{-1} .

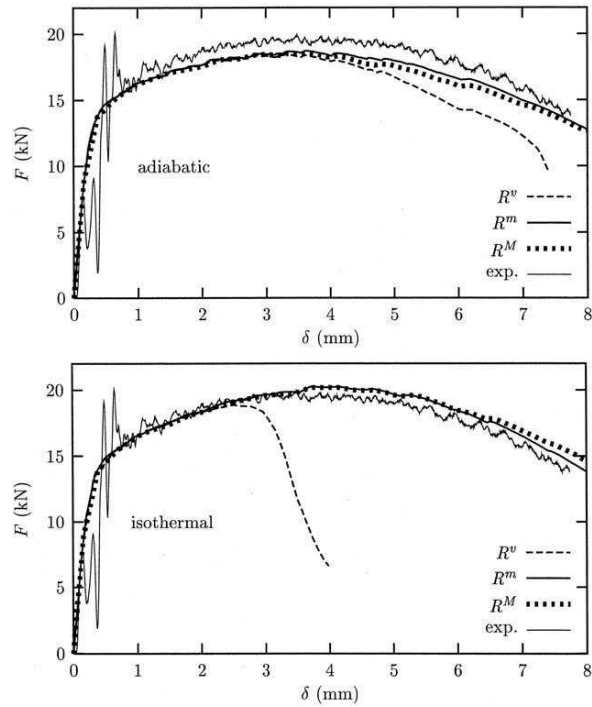


Figure 13. Charpy test: simulated and experimental (exp.) force (F)–deflection (δ) curves using the R^m and R^v models under adiabatic (top) and isothermal conditions (bottom).

5.2. RESULTS

5.2.1. Force–deflection curves

Computed and experimental force–deflection curves (F – δ) are compared on Figure 13. Simulations were made assuming either adiabatic or isothermal conditions. Using the R^m or R^M models, leads to a slight underestimation of forces assuming adiabatic conditions and to a slight overestimation with isothermal. This possibly indicates that heat diffusion is taking place. This hypothesis is validated by simple calculations using the thermal conductivity of A508 ($D \approx 2 \times 10^{-5} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$) that show that a in test lasting 1 ms (i.e. the duration of the tests at -60°C) the characteristic heat flow distance is about $150 \mu\text{m}$ which is about the mesh size.

The R^v model gives very different results. Under adiabatic conditions, the simulated response remains reasonably in agreement with the experiments. This seemingly satisfactory, and misleading result is due to the opposite effects of the temperature increase (which de-

An extension of the Rousselier model to viscoplastic temperature dependent materials 17

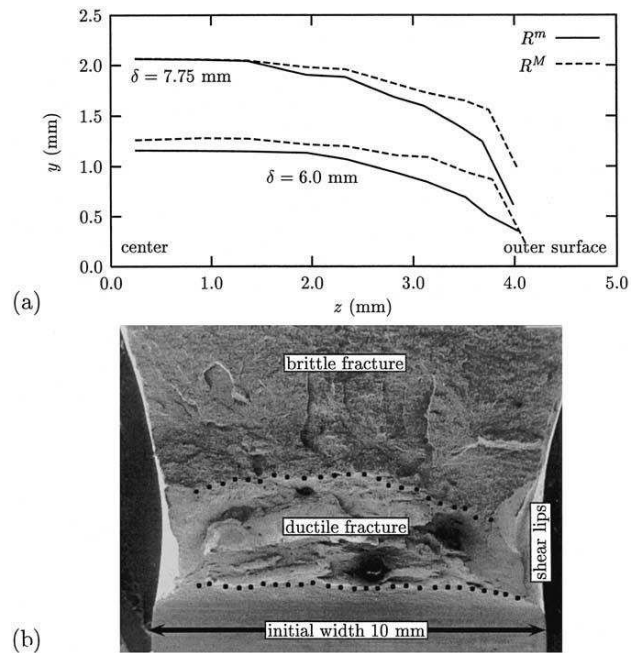


Figure 14. (a) Crack front position for deflections $\delta = 6.0$ mm and $\delta = 7.75$ mm (R^m and R^M models, adiabatic calculation). (b) Actual crack advance ($\delta = 7.75$ mm, $T = -60^\circ\text{C}$, dynamic Charpy test).

increases σ_{kk}) and of the viscosity (which increases σ_{kk}). Under isothermal condition, a rapid drop of the load is obtained which is not experimentally observed.

5.2.2. Crack advance

Figure 14a illustrates the shape of the computed crack front for two deflections. It is shown that crack advance is faster at the center of the specimen. The tunneling effect is often seen in structure where the stress state lies between plane strain and plane stress and varies along the thickness of the specimen (Rivalin *et al.*, 2001). This compares well with experiments (Figure 14b). At the outer free surface, shear lips are observed. The simulation is not able to represent this phenomenon. Although it is possible to represent slant fracture using the Rousselier model, this would require much finer elements along the x and z directions as shown in Besson *et al.* (2001b) for 2D structures.

Crack advance Δa as a function of the deflection is shown in Figure 15 and compared with experimental measurements. The experimental data were obtained from samples in which brittle failure took place for various deflections after a significant ductile crack growth. The crack length at the middle of the specimen as well as the mean crack length were measured on

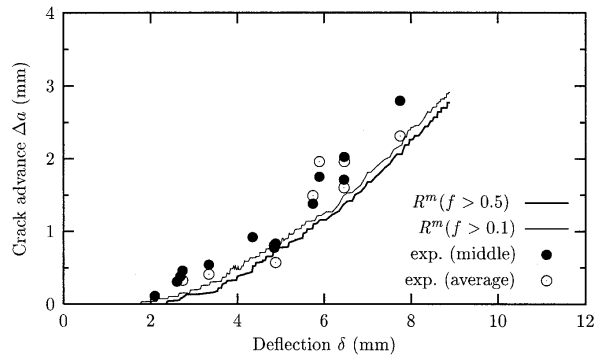


Figure 15. Crack advance Δa vs. deflection and comparison with experiments. Crack is either determined for $f > 0.5$ (i.e. the actual value used in the computations) or for $f > 0.1$ (R^m model, adiabatic calculation).

SEM photographs. The simulated crack extension was determined by computing the position of the broken Gauss point (i.e. Gauss points where f has reached 0.5). Using $f > 0.1$ to define the crack position results in a slightly longer crack extension (0.1 to 0.2 mm). In both cases the simulation slightly underestimates the actual crack length. It is experimentally shown that brittle fracture is usually initiated ahead of the crack front where stresses are maximum (Figure 16). It is very likely that the ductile crack front might further increase as the brittle crack is growing. This could account for the small discrepancy between experimental and simulated crack advances. Figure 16 illustrates the σ_{xx} contours for different deflections. It is shown that the maximum stress level is reached ahead of the crack tip at about 0.6 mm.

6. Concluding remarks

In this study, several extensions of the Rousselier model have been proposed which allow for the use of viscoplastic temperature dependent matrix behaviors. It was first shown that a straightforward extension of the model (R^v formulation) leads to results which are inconsistent with both unit cell calculations and experiments. The R^m extension uses the concept of effective stress and introduces two material parameters: D_R and q_R . It has the same kind of dependence on plastic hardening, strain rate and temperature as the extended Gurson model used in Needleman and Tvergaard (1991). The R^M extension is based on the previously formulation but parameters D_R and q_R depends on plastic strain so that the model has the same type of dependence on plastic hardening as the original Rousselier model (R^v for rate independent materials). All extensions retain the specific features of the yield surface of the original model: (i) Damage increases under pure shear. (ii) Under pure tensile hydrostatic loading ($\sigma_{eq} = 0$) the yield function has a vertex which implies that the deformation rate tensor always keeps a shear component. This last feature is thought to be important in the modeling of shear band and cup-cone fracture (Besson *et al.*, 2001b). The phenomenological extension of the model to Hill plastic anisotropy is straightforward following Besson *et al.* (2001a) and Benzerga and Besson (2001).

An extension of the Rousselier model to viscoplastic temperature dependent materials 19

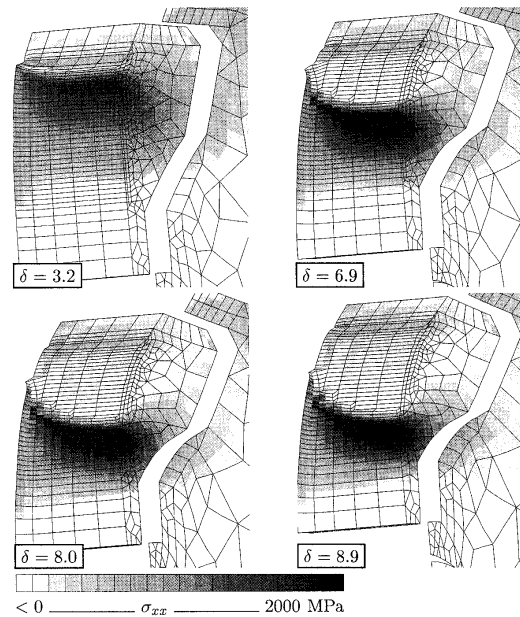


Figure 16. σ_{xx} contours for different deflections. Broken elements have been removed showing crack advance (R^m model, adiabatic calculation).

The comparison with unit cell calculations has shown a much better agreement for models R^m and R^M than for the R^v one. The agreement is similar to the one obtained using the Gurson model. The unit cell calculations show however that void growth tend to be delayed with increasing strain rate. This trend is in agreement with results published in Basu and Narasimhan (1999) but is not accounted for by the different models used in this study. Some authors propose to use damage parameters (q_1 and q_2 for the Gurson model and therefore q_R and D_R for the modified Rousselier model) which depend on the plastic strain rate (Tong and Ravichandran, 1995). The same solution has been recently adopted in Sainte Catherine *et al.* (2001). Using the original Rousselier model, σ_1 is assumed to depend on the strain rate. Like in the present work, this modification allows to describe ductilities under static and dynamic condition in a consistent way.

The models were used to simulate the behavior of round notch bars tested at different ram velocities. Experiments show an increase of the ductility with increasing velocities up to the point where adiabatic heating cannot be neglected. In this case, ductility is reduced. The increase of ductility is caused by the stabilizing role of viscosity. Extensions R^m and R^M of the Rousselier model as well as the Gurson model are able to reproduce the experimental trends whereag the R^v model does not give satisfactory results. On the one hand, it therefore clearly

appears that the R^v model should be rejected. On the other hand, the differences between the R^m and R^M models are too small to decide which of these two is to be preferred. Similar conclusions are drawn from the simulation of V-notch Charpy specimens under adiabatic and isothermal conditions.

Acknowledgements

Financial support from Direction de la Sûreté des Installations nucléaires (DSIN) and Electricité de France (EdF) is acknowledged. The authors thank Prof. A. Pineau for stimulating discussions.

References

- Abouaf, M., Chenot, J., Raisson, G. and Bauduin, P. (1988). 'Finite element simulation of hot isostatic pressing of metal powders'. *Int. J. Numerical Methods Eng.* **25**(1), 191–212.
- AFNOR (1990). Essai de flexion par choc sur éprouvette Charpy. Partie 1: méthode d'essai. Association française de normalisation, La défense, France.
- Anand, L., Kim, K. and Shawki, T. (1987). Onset of shear localization in viscoplastic solids. *J. Mech. Phys. Solids* **35**(4), 407–429.
- Barbier, G., Benallal, A. and Cano, V. (1998). Relation théorique entre la méthode de perturbation linéaire et l'analyse de bifurcation pour la prédiction de la localisation des déformations. *Comptes rendus de l'Académie des Sciences* **326**(3), 153–158.
- Basu, S. and Narasimhan, R. (1999). A finite element study of the effects of material characteristics and crack tip constraint on dynamic ductile fracture initiation. *J. Mech. Physics Solids* **47**, 325–350.
- Benzerger, A. and Besson, J. (2001). Porous plastic potentials for anisotropic solids. *Europ. J. Mech.* **20**(3), 397–434.
- Besson, J. and Abouaf, M. (1992). Rheology of porous alumina and simulation of hot isostatic pressing. *J. Amer. Ceram. Soc.* **15**, 2165–2172.
- Besson, J., Brocks, W., Chabanet, O. and Steglich, D. (2001a). Ductile rupture of aluminum sheet materials. *Europ. J. Finite Elements* **10**, 401–415.
- Besson, J. and Foerch, R. (1997). Large scale object-oriented finite element code design. *Computer Meth. Appl. Mech. Engineering* **142**, 165–187.
- Besson, J., Steglich, D. and Brocks, W. (2001b). Modeling of crack growth in round bars and plane strain specimens. *Int. J. Solids Struct.* **38**(46–47), 8259–8284.
- Bilby, B., Howard, I. and Li, Z. (1992). Prediction of the first spinning cylinder test using ductile damage theory. *Fatigue Fract. Engng Mater. Struct.* **16**(1), 1–20.
- Brocks, W., Sun, D.Z. and Honig, A. (1995). Verification of the transferability of micromechanical parameters by cell model calculations with visco-plastic materials. *Int. J. Plasticity* **11**, 971–998.
- Carosio, A., Willam, K. and Etse, G. (2000). On the consistency of viscoplastic formulations. *Int. J. Solids Struct.* **37**, 7349–7369.
- Chu, C. and Needleman, A. (1980). Void nucleation effects in biaxially stretched sheets. *J. Engin. Mat. Technol.* **102**, 249–256.
- Decamp, K., Bauvineau, L., Besson, J. and Pineau, A. (1998). Size and geometry effects on ductile rupture of notched bars in a C-Mn steel: Experiments and modelling'. *Int. J. Fracture* **88**(1), 1–18.
- Eripret, C. and Rousselier, G. (1994). First spinning cylinder test analysis using local approach to fracture. *Nucl. Engin. Design* **152**, 11–18.
- Fressengeas, C. and Molinari, A. (1985). Inertia and thermal effects on the localization of plastic flow. *Acta metall.* **33**(3), 387–396.
- Grange, M., Besson, J. and Andrieu, E. (2000). An anisotropic Gurson model to represent the ductile rupture of hydrided Zircaloy-4 sheets. *Int. J. Fracture* **105**(3), 273–293.
- Green, R. (1972). A plasticity theory for porous solids. *Int. J. Mech. Sci* **14**, 215–224.
- Gurson, A. (1977). Continuum theory of ductile rupture by void nucleation and growth: Part 1- Yield criteria and flow rules for porous ductile media. *J. Eng. Mat. Technol.* **99**, 2–15.

An extension of the Rousselier model to viscoplastic temperature dependent materials 21

- Howard, I., Li, Z. and Bilby, B. (1994). Ductile crack growth predictions for large centre cracked pallels by damage modelling using 3-D finite element analysis. *Fatigue Fract. Engng Mater. Struct.* **17**(8), 959–969.
- Koplik, J. and Needleman, A. (1988). Void growth and coalescence in porous plastic solids. *Int. J. Solids Struct.* **24**(8), 835–853.
- Kussmaul, K., Eisele, U. and Seidenfuss, M. (1993). On the applicability of local approaches for the determination of the failure behaviour of ductile steels. *J. Pressure Vessel Techn.* **115**, 214–220.
- Ladevèze, P. (1980). Sur la theorie de la plasticite en grandes deformations. Technical report, Rapport interne No. 9, LMT, ENS Cachan.
- Lemaitre, J. (1985). A continuous damage mechanics model for ductile fracture. *J. Eng. Mat. Technol. Trans. ASME* **107**, 83–89.
- Lemaitre, J. and Chaboche, J. (1985). *Mecanique des materiaux Solides*. Dunod.
- Li, Z., Bilby, B. and Howard, I. (1994). A study of the internal parameters of ductile damage theory. *Fat. Fract. Engng. Mater. Struct.* **17**(9), 1075–1087.
- Liu, Y., Murakami, S. and Kanagawa, Y. (1994). Mesh-dependence and stress singularity in finite element analysis of creep crack growth by continuum damage mechanics approach. *Eur. J. Mech. A/Solids* **13**(3), 395–417.
- Mathur, K., Needleman, A. and Tvergaard, V. (1994). 3D analysis of failure modes in the Charpy impact test. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **2**, 617–635.
- Needleman, A. and Tvergaard, V. (1991). An analysis of dynamic, ductile crack growth in a double edge cracked specimen. *Int. J. Fracture* **49**, 41–67.
- Rice, J. (1976). The localisation of plastic deformation. In: Koiter, W. (ed.) *Proc. 14th Int. Conf. Theoretical and Appl. Mech., Delft.* Amsterdam: North-Holland, pp. 207–220.
- Rice, J. and Rudnicki, J. (1980). A note on some features of the theory of localization of deformation. *Int. J. Solids Struct.* **16**, 597–605.
- Rivalin, F., Besson, J., Di Fant, M. and Pineau, A. (2001). Ductile tearing of Pipeline steel wide plates-II.: Modeling of in-plane crack propagation. *Engng Fract. Mech.* **68**(3), 347–364.
- Rousselier, G. (1987). Ductile fracture models and their potential in local approach of fracture. *Nucl. Engin. Design* **105**, 97–111.
- Rousselier, G. (1991). Application de l'analyse de stabilité d'une perturbation à la localisation de la déformation dans un matériel dilatable adoucissant'. *C.R. Acad. Sci. Paris* **S13**(Serie II), 1367–1373.
- Rousselier, G. (2001). Dissipation in porous metal plasticity and ductile fracture'. *J. Mech. Physics Solids* **49**, 1727–1746.
- Sainte Catherine, C., Poussard, C., Vodinh, J., Schill, R., Hourdequin, N., Galon, P. and Forget, P. (2001). Finite element simulations and empirical correlation for Charpy-V and sub-size Charpy tests on an unirradiated low alloy RPV ferritic steel. In: *Fourth symposium on small specimen test techniques, Reno, Nevada, to appear.*
- Schmitt, W., Sun, D. and Blauel, J. (1997). Recent advances in the application of the Gurson model to the evaluation of ductile fracture toughness. In: *Recent advances in fracture.*, TMS, pp. 77–87.
- Simo, J. and Taylor, R. (1985). Consistent tangent operators for rate-independent elastoplasticity. *Comput. Meth. Appl. Mech. Engin.* **48**, 101–118.
- Tanguy, B. (2001). Modelisation de l'essai Charpy par l'approche locale de la rupture. Application au cas de l'acier 16MND5 dans le domaine de la transition. Ph.D. thesis, Ecole des Mines de Paris.
- Tanguy, B., Piques, R., Laiarinandrasana, L. and Pineau, A. (2000). Mechanical behaviour of A508 steel based on double nonlinear viscoplastic constitutive equation. In: Miannay, D., Costa, P., François, D. and Pineau, A. (eds.): *EUROMAT2000, Advances in Mechanical Behaviour. Plasticity and Damage*. France: Tours, Elsevier, pp. 499–504.
- Tong, W. and Ravichandran, G. (1995). Inertial effects on void growth in porous visco plastic materials. *J. Appl. Mech.* **62**, 633–639.
- Tvergaard, V. and Needleman, A. (1984). Analysis of cup-cone fracture in a round tensile bar. *Acta metall.* **32**, 157–169.
- Tvergaard, V. and Needleman, A. (1988). An analysis of the temperature and rate dependence of Charpy V-Notch energies for a high nitrogen steel. *Int. Jour. Fract.* **37**, 197–215.

Available online at www.sciencedirect.com

International Journal of Pressure Vessels and Piping 85 (2008) 322–335

INTERNATIONAL JOURNAL OF
Pressure Vessels
and Pipingwww.elsevier.com/locate/ijpvp

Plastic and damage behaviour of a high strength X100 pipeline steel: Experiments and modelling

B. Tanguy^a, T.T. Luu^{a,b}, G. Perrin^b, A. Pineau^a, J. Besson^{a,*}^aCentre des Matériaux, Mines Paris, Paristech, CNRS UMR 7633, BP 87, 91003 Evry Cedex, France^bApplied Mechanics Division, IFP, 92852 Rueil-Malmaison, France

Received 11 January 2007; received in revised form 2 November 2007; accepted 6 November 2007

Abstract

The purpose of this work is to develop a constitutive model integrating anisotropic behaviour and ductile damage for a X100 pipeline steel. The model is based on a set of experiments on various smooth, notched and cracked specimens and on a careful fractographic examination of the damage mechanisms. The model is based on an extension of the Gurson–Tvergaard–Needleman model which includes plastic anisotropy. Provided brittle delamination is not triggered, the developed model can accurately describe the plastic and damage behaviour of the material. The model is then used as a numerical tool to investigate the effect of plastic anisotropy and delamination on ductile crack extension. It is shown in particular that it is not possible to obtain a unified description of rupture properties for notched and cracked specimens tested along different directions without accounting for plastic anisotropy.

© 2007 Elsevier Ltd. All rights reserved.

Keywords: Plasticity; Ductile damage; X100 pipeline steel

1. Introduction

Economic studies have shown that development of oil and gas transportation over long distances requires the use of high-grade steels whose mechanical properties allow to substantially increase the internal pressure for a given pipe thickness. Research projects have then been focused on the development of API grades X80 and X100 [1,2] and more recently to grades X120 [2]. These new grades are still under development. Their mechanical behaviour needs to be characterised both in terms of plastic behaviour and crack growth resistance. In particular resistance to ductile crack initiation and longitudinal propagation needs to be evaluated to assess the high-grade pipelines' structural integrity. In practice, standards recommend the use of Charpy-V or drop weight tear tests in relation with semi-empirical correlations to predict the outcome of full-scale burst tests of pipelines [3–5]. These correlations have been established on lower grade steels. Results of recent full-scale testing campaigns [6,7] have shown that these

correlations no longer hold for the new grades. This requires further studies on ductile damage of these new high-grade steels.

In these studies coupling gas decompression and material cracking resistance, the problem of the material fracture criteria remains a critical issue in particular in order to ensure the transferability between small scale tests and burst tests. Several methodologies have been proposed for that purpose (see e.g. [8]). It has been proposed to use one single global parameter such as the J -integral [9,10] or the dissipated energy [11–13]. However, as a fully three-dimensional (3D) stress field develops ahead of the crack tip, transferability between specimens having different thicknesses cannot be ensured. This has led to the use of a two parameters J - Q global approach [14,15]. On the other hand, descriptions at the local scale have been developed using a critical crack tip opening angle (CTOA) or cohesive zone models (CZM). These approaches have been applied successfully to predict crack growth in aluminium sheet specimens [16–19]. However, using CTOA and CZM, transferability between specimens of different thicknesses or geometries cannot be performed as both models sensitivity on stress triaxiality does not correspond

*Corresponding author.

E-mail address: jacques.besson@ensmp.fr (J. Besson).

to physical processes of void growth [20]. Both models are nevertheless useful to perform structural computations involving crack growth provided that the stress state in the structure corresponds to that of the specimens used to tune the model.

In order to get the proper dependency on the stress state it is necessary to use physically motivated models which describe in a realistic manner the different stages of ductile rupture. These models make use of the early description of void growth by Rice and Tracey [21]. They are based on continuum damage mechanics and account for the softening effect induced by cavity growth (ductile fracture) using yield potentials integrating damage such as those proposed by Gurson [22], Tvergaard [23] or Rousselier [24]. As long as ductile damage mechanisms remain identical, transferability between laboratory test samples and structures is reasonably ensured. These local approach to fracture models have been successfully applied to model crack growth in structures (see e.g. [25]). They have been recently applied to model rupture of thin structures [26–29]. The latter studies have used extensions of the Gurson or Rousselier models that account for plastic anisotropy [27,29,30] which is of particular interest for pipeline steels.

The aim of this paper is to characterise and model the plastic and damage behaviour of a X100 pipeline steel which was supplied as a plate from which tubes are produced. For this purpose, a micromechanical Gurson-type model is used as transferability between laboratory specimens and structures is of primary importance. Simulations are based on experimental results obtained on a large set of mechanical tests. The investigated material

and the experimental techniques are first presented. Results of the mechanical tests together with detailed fractographic examinations are then given. The model used to describe the material includes two ingredients: a specific yield surface accounting for plastic anisotropy, a model coupling plasticity and ductile damage. The different tests are then simulated. Finally the model is used to discuss the effect of plastic anisotropy on rupture. Delamination, which as observed during the study, was also commented based on the model.

2. Material and experimental procedures

2.1. Material

The material of this study is a high strength steel that is used to manufacture X100 pipelines. It was supplied as a 18.4 mm thick plate. The nominal chemical composition is given in Table 1. The plate was elaborated using thermo-mechanical controlled rolling and accelerated cooling (TMCP process). The resulting microstructure is mainly ferritic–bainitic with a clear band-like structure (Fig. 1a).

As second phase particles are well known to be at the origin of cavity nucleation, a particular attention was paid to their characterisation. X-ray analysis carried out on polished surfaces reveals that most observed inclusions are composed of calcium sulfide (CaS), titanium nitride (TiN), aluminium or magnesium oxides (Al_2O_3 , MgO). An inclusion volume fraction equal to 1.35×10^{-4} was evaluated using quantitative image analysis. High magnification scanning electron microscope (SEM) observation of etched (Nital) surfaces reveals the presence of martensite–austenite (M–A) islands as shown in Fig. 1b. Despite processing, particle remains mainly isotropic: spherical CaS, cubic TiN and equiaxed M–A. In addition, the material also contains small carbides (Fe_3C cementite).

Due to material processing, the plate has an anisotropic plastic behaviour (see Section 3.1) so that it is important to keep track of the material principal axes. In the following the longitudinal direction corresponding to the rolling direction is referred to as L; the transverse direction is

Table 1
Nominal chemical composition (weight %)

| C | Si | Mn | P | S | Al | N |
|-------|------|------|-------|--------|-------|-------|
| 0.060 | 0.25 | 1.90 | 0.011 | 0.0010 | 0.029 | 0.005 |

Other alloying elements: Ni, Mo, Nb, V and Ti.

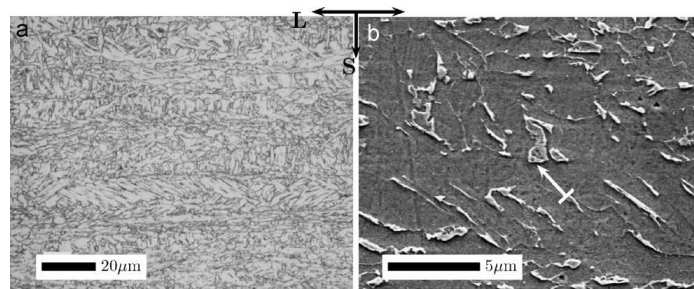


Fig. 1. (a) Plate microstructure consisting of ferrite grains and bainite bands. (b) SEM micrograph obtained after etching. An M–A island is shown by the white arrow.

referred to as T and the short transverse (thickness) direction is referred to as S.

2.2. Experimental procedures

A comprehensive characterisation of the mechanical properties of the material was carried out along the different material directions using several specimen geometries which are presented in Figs. 2 and 3. All tests were performed at room temperature on a servo-hydraulic testing machine.

Smooth tensile bars (ST) are used to determine the hardening behaviour along the principal directions. A shorter specimen (ST_r) is used for tests carried out in the S direction due to the limited thickness of the plate. Strain rate equal to $5 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ is kept constant during the test. Diameter reduction across two perpendicular directions is measured to obtain the Lankford coefficients. The Lankford coefficients for a test carried out in the L direction (resp. T or S direction) is defined as $R_L = \varepsilon_T / \varepsilon_S$ (resp.

$R_T = \varepsilon_L / \varepsilon_S$, $R_S = \varepsilon_T / \varepsilon_L$) where ε_X is the true deformation in the X (= L, T or S) direction.

Axisymmetric notched tensile bars (NT_r, Fig. 2) are used to characterise both plastic behaviour and damage growth. Tests are performed for L and T directions. Different notch radii are used to modify the stress triaxiality ratio inside the specimens [31]. Radii equal to 0.6, 1.2 and 2.4 mm are used corresponding to specimens NT₁, NT₂ and NT₄, respectively. The axial elongation as well as the minimum diameter variation along the S direction ($\Delta\phi_S$) are continuously measured. The mean strain rate computed from the diameter variation is controlled and fixed to $5 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$.

Wide and relatively thin specimens are used to generate plane strain (PE) conditions. Finite element calculations were used to check that the plane strain conditions prevail in the specimens. The plane strain direction corresponds to the width of the specimen (see arrow in Fig. 2) as deformation along this direction is constrained by the thicker lower and upper parts. Tests were carried out in the

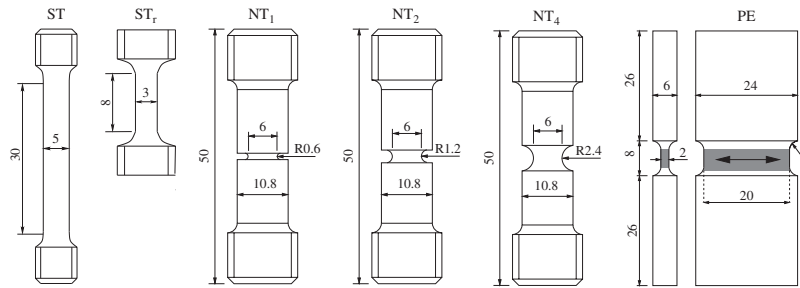


Fig. 2. Samples for mechanical testing: smooth tensile bars (ST), smooth reduced tensile bars (ST_r) for testing along the S-direction, notched tensile bars with different notch radii (NT₁, NT₂ and NT₄) and plane strain specimens (PE). The large arrow indicates the plane strain direction. PE conditions are met at the centre of the specimen (dimensions in mm).

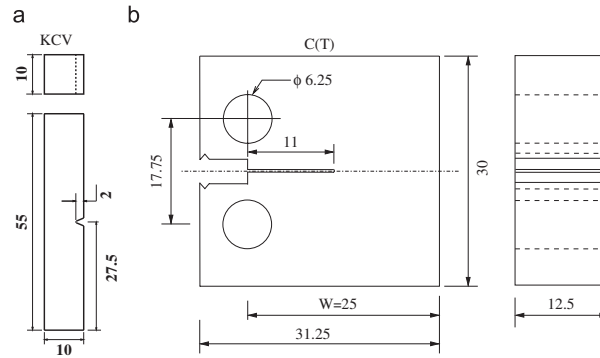


Fig. 3. Samples for mechanical testing: (a) Charpy V-notched bars (KCV) (b) compact tension specimens (C(T)) (dimensions in mm).

L and T directions with an imposed displacement rate corresponding to a mean strain rate of $5 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ at the centre of the specimen.

Ductile crack initiation and propagation were studied using Charpy notched bars (KCV) and compact tension (C(T)) specimens (Fig. 3). L–T (resp. T–L) configuration was investigated in which L (resp. T) corresponds to the loading direction and T (resp. L) to the crack propagation direction.

Conventional Charpy V-notched specimens were either tested on a 3-point bending setup at a low imposed displacement rate of $10 \mu\text{m s}^{-1}$ (quasi-static test) or in a standard instrumented Charpy testing device with a striker impact velocity equal to 5.2 m s^{-1} (impact test). The 3-point bending setup geometry corresponds to the geometry of the Charpy device [32].

Crack growth resistance was investigated using (C(T)) specimens with a total thickness $B = 12.5 \text{ mm}$. Specimens with and without side grooves were both used. The side grooves have each a depth of $0.1B$; they are used to delay the development of crack tunneling and to maintain a straight crack front. C(T) specimens were fatigue-pre-cracked in order to obtain an initial crack length a_0 equal to $0.57W$ (see Fig. 3). The J - Δa resistance curve was determined using both single specimen (i.e. using the unloading compliance) and multi-specimen technique in accordance with ASTM-1820. The single specimen technique was applied to side-grooved specimens only. In the

case of non side-grooved specimens, the ductile crack extension was determined from direct measurements of crack advance of specimens which were broken at liquid nitrogen temperature after unloading.

3. Experimental results

3.1. Anisotropic plastic behaviour

Table 2 gives standard tensile properties obtained along L, T and S directions. Anisotropy in terms of yield stress and ultimate tensile stress (UTS) exists but is limited ($\pm 3\%$); on the other hand deformation anisotropy is marked as Lankford coefficients strongly differ from 1. Initially circular cross-sections of tensile specimens become elliptic upon deformation due to plastic anisotropy as evidenced in Fig. 4. Values of the Lankford coefficients for tensile test in L and T directions smaller than 1 reflect a high deformability of the material along the short transverse direction. The uniform elongation (UE) is less than 8% evidencing the poor work hardening capacity of the material.

3.2. Fractographic examination

Fracture surfaces were systematically examined to determine damage triggering sites. At macroscopic scale (see e.g. Fig. 4b) flat fracture regions (i.e. the normal to the

Table 2

Tensile ($R_{p0.2}$: flow stress at 0.2% plastic strain, UTS: ultimate tensile strength, UE: uniform elongation), Charpy (USE: upper shelf energy) and toughness properties

| Loading direction | $R_{p0.2}$ (MPa) | UTS (MPa) | UE (%) | Lankford coefficient | Charpy USE (J) | $J_{0.2}$ (kJ/m ²) | dJ/da (MPa) |
|-------------------|------------------|-----------|--------|--------------------------------|----------------|--------------------------------|---------------|
| L | 574 | 770 | 7.8 | $\epsilon_T/\epsilon_S = 0.53$ | 296 (L–T) | 830 (L–T) | 375 |
| T | 614 | 797 | 6.6 | $\epsilon_L/\epsilon_S = 0.79$ | 309 (T–L) | 510 (T–L) | 390 |
| S | 606 | 759 | 6.1 | $\epsilon_T/\epsilon_L = 0.69$ | | | |

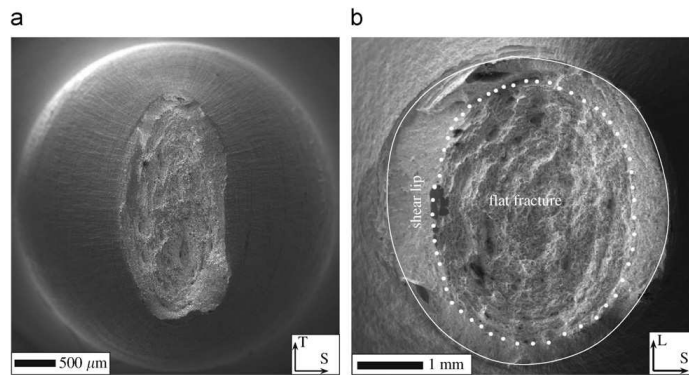


Fig. 4. Fracture surfaces: (a) smooth tensile specimen (loading along the L direction), (b) NT₄ specimen (loading along the T direction).

fracture surface is parallel to the loading direction) and slant fracture regions (i.e. the so-called “cup and cone” or “shear lips” fracture) are observed. Fig. 5 shows detailed views of the flat fracture zones of different notched bars. Photographs were taken at the centre of the fracture surface. In the case of ST and NT₄ specimens, two populations of dimples can be evidenced: (i) large dimples (about 20 μm) initiated at TiN, oxides or CaS particles, (ii) small dimples (about 1 μm) probably initiated at carbides or M–A constituents. Large (resp. small) dimples will be referred to as primary (resp. secondary) dimples. On NT₂ specimens, the amount of primary dimples is increased and they are the only dimples seen in NT₁ specimens. This indicates that particles at the origin of primary dimples nucleate first. A high level of plastic strain is needed to nucleate secondary dimples which are observed at locations where stress triaxiality is not high enough to promote rapid failure by internal necking between primary dimples. This

conclusion is well corroborated by observations on KCV (Fig. 6) and C(T) samples: (i) in slant fracture/shear lips regions (i.e. zones corresponding to low stress triaxiality levels) growth of primary voids is limited, (ii) at the centre of the specimen (i.e. zones corresponding to high stress triaxiality levels) in the flat fracture zone, only primary dimples are observed. Fracture surfaces of plane strain specimens are close to those of ST specimens: i.e. dominated by secondary dimples. This is again consistent with previous observations as stress triaxiality is low in that kind of specimen.

Delamination was observed in some of the specimens. The normal to the delamination crack always corresponds to the S direction. An example of delamination in a C(T) specimen is given on Fig. 7. Delamination occurs after about 1 mm ductile tearing close to the centre of the specimen. After delamination has occurred, ductile crack growth resumes around the delamination crack. Large

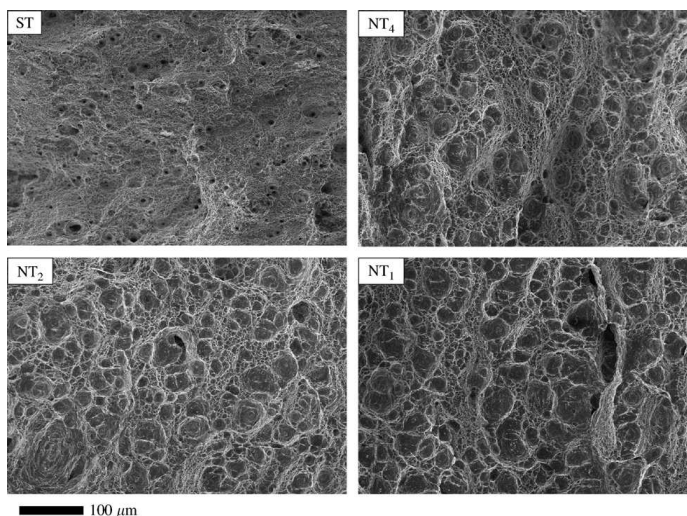


Fig. 5. Fracture surfaces of ST, NT₄, NT₂ and NT₁ specimens (tested along the T direction) showing the increasing proportion of primary cavities with increasing notch severity (i.e. increasing stress triaxiality).

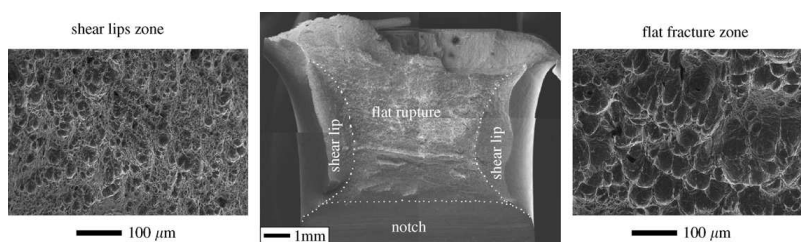


Fig. 6. Fracture surface of a KCV sample (T–L configuration).

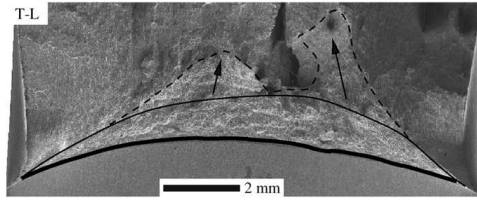


Fig. 7. Ductile crack growth and delamination in a C(T) specimen (T-L configuration): Thick line: initial fatigue crack front, thin line: possible crack front before delamination and thin dashed line: crack front after delamination.

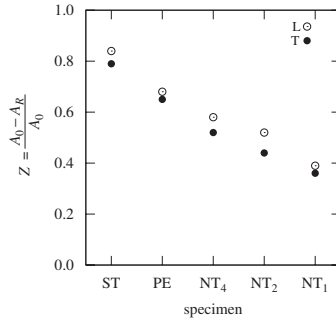


Fig. 8. Reduction area ratio Z for different specimen geometries.

delamination was essentially observed in C(T) specimens corresponding to the T–L configuration.

3.3. Ductility and crack growth

The area reduction at fracture Z is defined as $Z = (A_0 - A_R)/A_0$ where A_0 is the initial cross-section and A_R the cross-section at fracture. It is plotted in Fig. 8 for different specimen geometries tested in the L and T directions. As expected ductility decreases with specimen severity as the area reduction is maximum for tensile specimen and minimum for the most severely notched axisymmetric bars (NT₁). Ductility obtained on plane strain specimens is close to that of tensile bars. Note that due to necking stress triaxiality increases rapidly in tensile bars [33]. The ductility in the L direction appears to be slightly but consistently higher than in the T direction. Each test was repeated 2 or 3 times and very little scatter was found both for the overall plastic behaviour and for the ductility.

Impact Charpy fracture energies (USE) are listed in Table 2 for L–T and T–L configurations showing little dependence on the orientation (2%). Ductile behaviour in presence of a crack is examined using the J – Δa curves which are plotted in Fig. 9. $J_{0.2}$ values, which represent the dissipated energy at crack initiation, are significantly higher

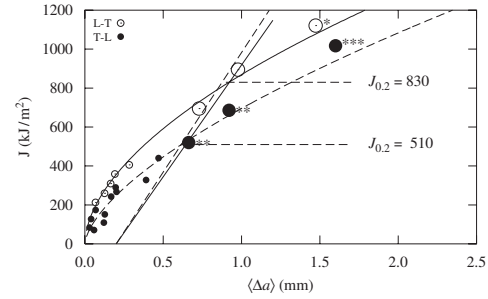


Fig. 9. J – Δa curves for L–T and T–L configurations. Small (resp. large) dots correspond to specimens with (resp. without) side grooves. Stars qualitatively indicate the level of delamination (from low * (< 0.5 mm) to high *** (> 2 mm)). The average crack growth (Δa) is computed according to ASTM-1820 standard.

for the L–T configuration; tearing moduli (dJ/da), which are more representative of crack propagation, remain close for both configurations (Table 2). These results have to be carefully interpreted because of delamination which is observed in the case of the T–L configuration for relatively small amount of ductile tearing (less than 2 mm) in particular for side grooved specimens. Data reported in Fig. 9 correspond to results obtained before macroscopic delamination which causes a sharp load drop.

4. Model for the anisotropic plastic behaviour

4.1. Model

The material under study presents a complex anisotropic behaviour which cannot be represented by a simple quadratic yield surface such as the one proposed by Hill [34]. This yield condition was previously used to describe the plastic behaviour of pipeline steels (see e.g. [29]) but was unable to satisfactorily describe simultaneously yield anisotropy and Lankford coefficients in all directions. To overcome this difficulty, the yield condition proposed by Bron and Besson [35] is used in this work. This phenomenological yield function is proposed to represent plastic anisotropy of aluminium sheets. It is an extension of the functions given by Barlat et al. [36] and Karafillis and Boyce [37]. Plastic anisotropy is represented by 12 parameters in the form of two fourth order symmetric tensors. Four other parameters influence the shape of the yield surface uniformly. The model is based on the definition of an equivalent stress $\bar{\sigma}$

$$\bar{\sigma} = (\alpha_1 \bar{\sigma}_1^a + \alpha_2 \bar{\sigma}_2^a)^{1/a} \quad (1)$$

with $\alpha_1 = \alpha$ and $\alpha_2 = 1 - \alpha$. The equivalent stresses $\bar{\sigma}_1$ and $\bar{\sigma}_2$ are defined as

$$\bar{\sigma}_k = \Psi_k^{1/b_k} \quad (2)$$

with

$$\Psi_1 = \frac{1}{2}(|S_1^3 - S_1^{3|b_1}| + |S_1^3 - S_1^{1|b_1}| + |S_1^1 - S_1^{2|b_1}|), \quad (3)$$

$$\Psi_2 = \frac{3^{b_2}}{2^{b_2} + 2} (|S_2^1|^{b_2} + |S_2^2|^{b_2} + |S_2^3|^{b_2}), \quad (4)$$

where $S_1^1 \geq S_2^2 \geq S_3^3$ (resp. $S_2^1 \geq S_2^2 \geq S_2^3$) are the eigenvalues of a modified stress deviator \underline{s}_1 (resp. \underline{s}_2) defined as

$$\underline{s}_1 = \underline{L}_1 : \underline{\sigma} \quad \text{and} \quad \underline{s}_2 = \underline{L}_2 : \underline{\sigma}, \quad (5)$$

where $\underline{\sigma}$ is the stress tensor. \underline{L}_1 and \underline{L}_2 are fourth order tensors expressed as in Voigt representation:

$$\underline{L}_k = \begin{pmatrix} \frac{1}{3}(c_k^2 + c_k^3) & -\frac{1}{3}c_k^3 & -\frac{1}{3}c_k^2 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{3}c_k^3 & \frac{1}{3}(c_k^3 + c_k^1) & -\frac{1}{3}c_k^1 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{3}c_k^2 & -\frac{1}{3}c_k^1 & \frac{1}{3}(c_k^1 + c_k^2) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_k^4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_k^5 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_k^6 \end{pmatrix}. \quad (6)$$

Finally the yield surface is expressed as

$$\phi = \bar{\sigma} - R(p), \quad (7)$$

where $R(p)$ is the flow stress (assuming isotropic hardening only). The effective plastic strain, p , is defined, for the undamaged material, by the condition: $\bar{\sigma} \dot{p} = \underline{\sigma} : \dot{\underline{\epsilon}}_p$, where $\dot{\underline{\epsilon}}_p$ is the plastic strain rate tensor defined by the normality rule, i.e.:

$$\dot{\underline{\epsilon}}_p = \dot{p} \frac{\partial \phi}{\partial \underline{\sigma}}. \quad (8)$$

4.2. Parameter adjustment

The previous plasticity model is complex and has several material parameters to be adjusted: a , b_1 , b_2 , α , $c_1^{1..6}$ and $c_2^{1..6}$ as well as the hardening function $R(p)$. In the following the model will be simplified assuming $a = b_1 = b_2$. The flow stress is expressed as

$$R(p) = R_0(1 + Q_1(1 - \exp(-k_1 p)) + Q_2(1 - \exp(-k_2 p))), \quad (9)$$

where R_0 can be fixed arbitrarily so that four additional fitting parameters (Q_1 , k_1 , Q_2 and k_2) are used in the model. The fitting strategy proposed in [35] is used in this study. Two nonlinear terms are used in the expression of the flow stress to obtain a good fit over the whole plastic strain range (up to 0.8). The first one ($Q_1(1 - \exp(-k_1 p))$) quickly reaches a plateau as k_1 is much larger than k_2 . It is used to fit the early stages of work hardening. The second one ($Q_2(1 - \exp(-k_2 p))$) allows to fit hardening for high value of plastic strain. Tensile tests along L, T and S directions are used as well as tests on all different notched bars. In the case of tensile bars, force–axial displacement curves are used together with measurements of Lankford coefficients. In the case of notched bars, force–diameter reduction curves are used; diameter reduction along

Table 3
Material model parameters

| | |
|-----------------------|-----------------------------|
| Elastic properties | |
| E | 210 GPa |
| ν | 0.3 |
| Plastic hardening | |
| R_0, Q_1, k_1 | 580 MPa, 0.367, 46.84 |
| Q_2, k_2 | 1.119, 0.741 |
| Anisotropic model | |
| a, α | 9.25, 0.7 |
| c_1^1, c_1^2, c_1^3 | 1.022, 1.009, 0.961 |
| c_1^4, c_1^5, c_1^6 | 1.140, 1.116, 1.118 |
| c_2^1, c_2^2, c_2^3 | 1.572, 0.442, 0.536 |
| c_2^4, c_2^5, c_2^6 | 1, 0.924, 1.183 |
| Strain rate effect | |
| K, n | 55 MPa s ^{1/n} , 5 |
| GTN model | |
| f_0 | 1.35 × 10 ⁻⁴ |
| q_1, q_2 | 1.6, 1 |
| f_c, δ | 0.02, 4.5 |
| A_n | 0.02 for 0.5 < p < 1 |
| h_L | 200 μm |

the S direction is used as this direction tends to deform the most.

All tests were carried out at low strain rate so that the material may be assumed to be rate independent. However, in order to model the impact Charpy tests it is necessary to account for rate dependence as experimental results evidence an increase of the maximum load when compared to quasi-static 3-point bending tests (+15%, see also [38]). In that case the plastic multiplier \dot{p} is computed using a Norton flow rule which introduces two additional material parameters (K and n):

$$\dot{p} = \left\langle \frac{\phi}{K} \right\rangle^n = \left\langle \frac{\bar{\sigma} - R}{K} \right\rangle^n. \quad (10)$$

K and n were fitted to represent the maximum load obtained from impact Charpy tests. Finally it is worth noting that as the initial porosity is very small fitting of parameters describing plastic behaviour can be performed neglecting damage evolution. Adjusted material model parameters are shown in Table 3.

5. Model for ductile damage

5.1. Model

Ductile tearing is modelled using the Gurson–Tvergaard–Needleman (GTN) model [23] adapted to account for plastic anisotropy and strain rate dependence. Damage is represented by a single scalar variable f representing void volume fraction. Damage is consequently assumed to be isotropic. The model relies on the definition of an effective scalar stress σ_* which depends on the applied stress tensor and on damage. The effective stress is given by the

following implicit equation [39]:

$$\frac{\bar{\sigma}^2}{\sigma_*^2} + 2q_1 f_* \cosh\left(\frac{q_2 \sigma_{kk}}{2 \sigma_*}\right) - 1 - q_1^2 f_*^2 = 0, \quad (11)$$

where σ_{kk} is the trace of the stress tensor $\underline{\sigma}$ while q_1 and q_2 are material parameters. The equivalent stress defined in Section 4 for the anisotropic plasticity is used in lieu of the von Mises stress for an isotropic material. This technique to account for anisotropic plasticity coupled with isotropic damage was previously used in [27,29,30]. f_* is a function of the porosity f introduced to represent final failure by void coalescence. Using the definition of the effective stress, the yield surface is now expressed as

$$\phi = \sigma_* - R(p). \quad (12)$$

The flow stress R corresponds to that of the undamaged material and is therefore given by Eq. (9). The plastic strain rate tensor is given by the normality rule as

$$\dot{\underline{\epsilon}}_p = (1-f)\dot{p} \frac{\partial \phi}{\partial \underline{\sigma}} \quad (13)$$

so that $\underline{\sigma} : \dot{\underline{\epsilon}}_p = (1-f)\sigma_*\dot{p}$ which expresses the equality between the plastic dissipation at the macroscopic level (left-hand side) and the microscopic level (right-hand side) [22]. The evolution of the porosity is controlled by void growth and nucleation of new voids

$$\dot{f} = (1-f)\text{trace}(\dot{\underline{\epsilon}}_p) + A_n \dot{p}, \quad (14)$$

where the first term on the right-hand side corresponds to void growth (and mass conservation) and the second term corresponds to void nucleation. Material parameter A_n controls nucleation rate.

Models including damage lead to material softening and mesh size dependence when standard finite element techniques are used. In that case, it is necessary to fix the mesh size in order to obtain results transferable from one sample to another. This technique is often used in the case of ductile rupture [24,25,27,40] although improved the so-called “non-local” models can be used to obtain mesh independent results [41,42]. Consequently, the mesh size and in particular the mesh height in the direction perpendicular to the crack plane, h_\perp [20] should be considered as an adjustable material parameter.

5.2. Parameters adjustment

Several material parameters relative to ductile damage need to be determined: the initial void volume fraction, f_0 , the GTN model parameters, q_1 , q_2 , f_* and A_n and the mesh size, h_\perp .

The initial porosity is chosen equal to the inclusion (CaS + TiN + oxides) volume fraction as these particles are found inside the largest dimples. It is consequently assumed that matrix/inclusion debonding occurs very rapidly (i.e. instantaneous nucleation).

Nucleation corresponds to void formation around Fe₃C carbides and M–A constituents (i.e. secondary particles).

This process corresponds to the formation of small secondary dimples observed on the fracture surfaces. When the stress triaxiality ratio is high enough (i.e. NT₁ or C(T) specimens), growth of cavities initiated at primary inclusions is fast enough to induce failure by internal necking [43] before the onset of nucleation at secondary particles. This indicates that a certain level of plastic deformation is required to nucleate secondary voids. To represent this threshold effect A_n is expressed as

$$A_n = \begin{cases} A_n^0 & \text{if } p_s \leq p \leq p_c, \\ 0 & \text{otherwise,} \end{cases} \quad (15)$$

where A_n^0 is assumed to be constant. Nucleation starts when p reaches p_s which was determined based on the fractographic observations of notched tensile bars: $p_s = 0.5$. p_c (end of nucleation) is chosen equal to 1.0 but this level of deformation is hardly reached.

The usual expression for f_* was chosen in this work [23]:

$$f_* = \begin{cases} f & \text{if } f \leq f_c, \\ f_c + \delta(f - f_c) & \text{otherwise,} \end{cases} \quad (16)$$

where f_c represents the critical porosity for which coalescence starts. δ is an “accelerating” factor which represents the increased softening effect of pores once coalescence has started. Mesh size h_\perp needs to be adjusted on specimens containing cracks. In this study quasi-static Charpy specimens (T–L) were used. q_2 was chosen equal to 1.0 as in many other studies and q_1 was adjusted.

Finally the parameters that need to be numerically adjusted are q_1 , A_n^0 , f_c , δ and h_\perp . This was performed by trial and error using notched bars and Charpy specimens with loading along the T-direction. C(T) specimens and tests along the L-direction were used to validate the identification. Adjusted material parameters are also shown in Table 3.

6. Finite element simulation of rupture

6.1. Simulation technique

The modified GTN model was implemented in the FE software Zebulon, developed at Ecole des Mines de Paris [39,44]. An implicit scheme is used to integrate the constitutive equations. The consistent tangent matrix is computed using the method proposed in [45]. The material is considered as broken when f_* reaches $1/q_1 - \varepsilon$ with $\varepsilon = 10^{-3}$. In that case, the material behaviour is replaced by an elastic behaviour with a very low stiffness (Young’s modulus: $E_b = 1$ MPa). A similar technique was used in [46] showing convergence of the results for sufficiently low values of the Young modulus E_b . Gauss points where these conditions are met are referred to as “broken Gauss points”. An updated Lagrangian formulation was used in which Jauman stress rates are used [47]. Calculations were done using quadratic elements with reduced integration. Plane strain (PE) and 3D elements were used. Due to the

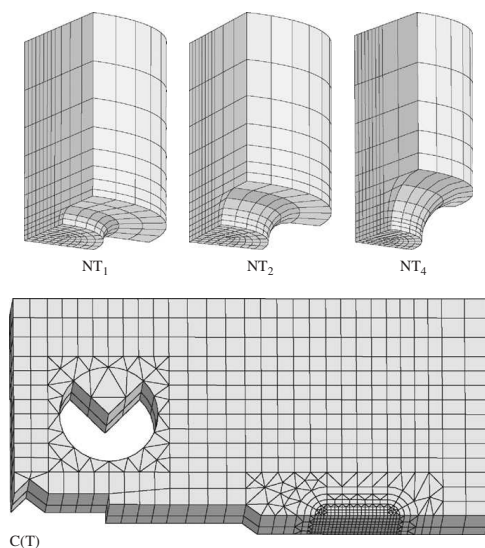


Fig. 10. Examples of 3D meshes.

anisotropic behaviour, notched bars must be meshed using 3D elements. In regions where the crack propagates, eight nodes (PE) and 20 nodes (3D) elements were used. Meshes are shown in Fig. 10. Convergence in terms of macroscopic load and local damage growth was checked as proposed in [27]. Usual symmetry conditions are accounted for in order to reduce the size of the calculations.

6.2. Notched tensile bars

Fig. 11 compares the experimental and simulated force–diameter reduction curves for notched bars tested in T and L directions. Experiments and simulations both present a sharp load drop which corresponds to the initiation of a macroscopic crack at the centre of the specimens. A good fit is obtained for the T direction. Simulations tend to slightly underestimate ductility in the L direction. This tends to indicate a slight anisotropic rupture behaviour which is not accounted for in this study. Models including void shape and void spacing could be used for that purpose [48–50]. On the other hand, anisotropic plastic behaviour is very well represented by the model.

6.3. Plane strain specimens

Fig. 12 compares the experimental and simulated force–displacement curves for plane strain specimens tested in the T and L directions. A good description of the overall behaviour and of ductility is obtained. Examination (see Fig. 11) of the fracture surface shows a crack path in the plane normal to the plane strain direction which forms

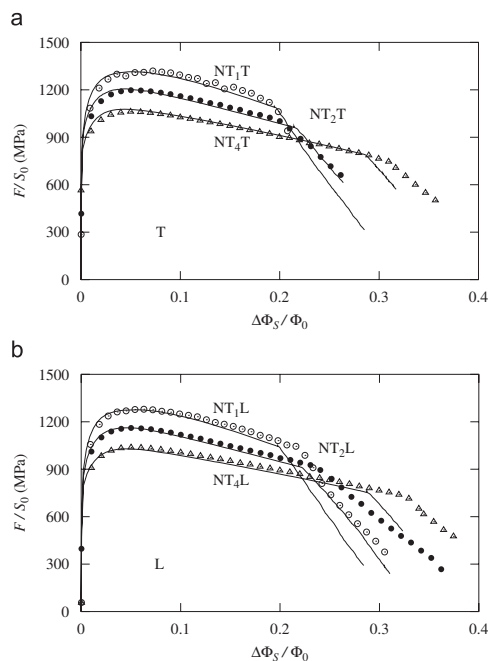


Fig. 11. Comparison of experimental (symbols) and simulated (lines) force–diameter reduction curves for notched specimens tested in the T (a) and L directions (b). (F : applied force, S_0 : initial minimum cross-section, $\Delta\Phi_S$ diameter reduction along the S direction, Φ_0 : initial diameter of the minimum cross-section).

either a V or an inclined plane. Both cases correspond to slant fracture as described in [51]. The fracture surface exhibits small secondary dimples. The model developed in this study predicts a flat surface plane; this is related to the coarse mesh needed to model crack growth. Using a finer mesh can allow to reproduce slant fracture [51]. In all cases the simulated ductility corresponds to the actual one as it is little affected by the mesh size.

6.4. Charpy specimens

Charpy test is a complex test which involves many effects. This complexity makes the Charpy test difficult to simulate and difficult to interpret as a fracture test as most of the effects are not related to damage processes leading to rupture [38]. As far as the determination of the USE is concerned, inertia effects can be neglected [52,53] and 3D calculations must be carried out as plane strain state overestimates stresses [38]. Contact has to be accounted for, in particular sliding between the specimen and the anvils must be allowed [38]. A friction coefficient equal to 0.1 was used in this study. Strain rate dependence must also be

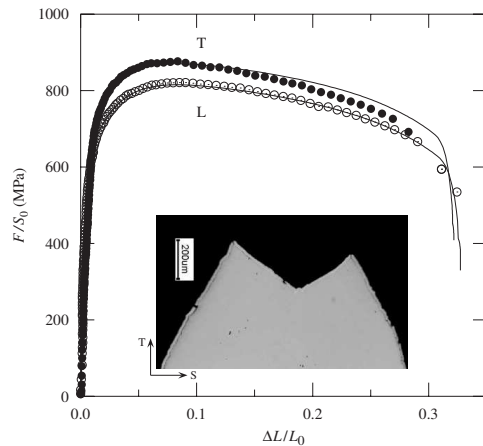


Fig. 12. Comparison of experimental (symbols) and simulated (lines) force-displacement curves for plane strain specimens tested in T and L directions (ΔL : displacement measured with gauge length equal to 10 mm, L_0 : initial height of the reduced thickness zone (gray in Fig. 2), $L_0 = 4$ mm). The photograph shows a cross-section of the specimen indicating a V-shaped slanted fracture surface. It corresponds to a specimen tested in the T direction so that plane strain conditions prevail in the L direction.

accounted for in order to represent both dynamic loading (5 m s^{-1}) and quasi-static loading ($10 \mu\text{m s}^{-1}$ as in this study). As mechanical properties of the investigated steel are expected to be weakly dependant on temperature above room temperature, it was decided to neglect adiabatic heating due to rapid plastic deformation. The FE mesh is shown in Fig. 13 together with comparisons of the simulated and experimental load-displacement curves for both configurations; i.e. T-L (used for fitting) and L-T (used for validation). A very good agreement is found even for deflection up to 20 mm. In actual tests, shear lips are created on both free sides of the notch (see Fig. 6) with a corresponding area of about 20% of the total fracture surface. Again, to correctly model this phenomenon a very large number of elements would be required [39]. The question of the importance of the shear lip formation on rupture energy dissipated during Charpy test still remains an open question. In the model the shear lip zone corresponds to locations where nucleation of secondary dimples occurred (as observed on the specimens). Using the proposed void nucleation law it is however possible to model the correct mean crack advance in Charpy specimens despite the fact that slant fracture is not reproduced [38]. This result is in agreement with results obtained on plane strain specimens.

6.5. C(T) specimens

Load-load line displacement curves obtained from C(T) specimens are shown in Fig. 14a for L-T and T-L

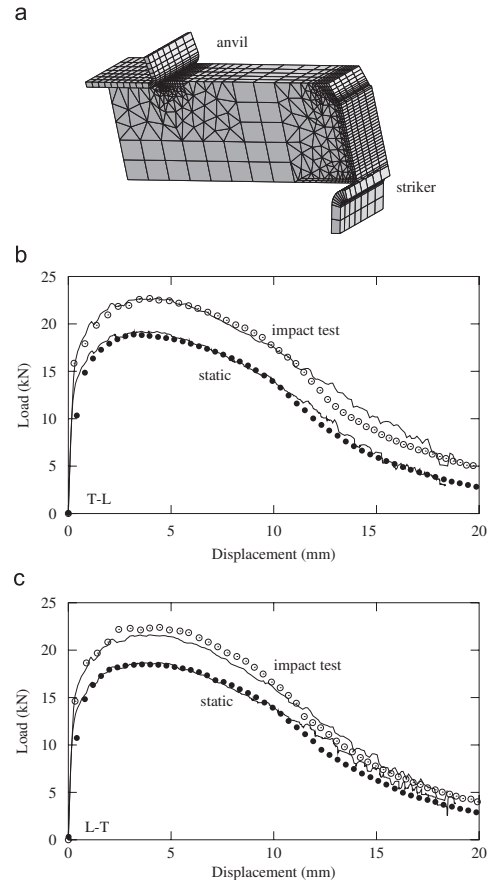


Fig. 13. Simulation of the static and impact Charpy tests: (a) FE mesh, (b) load-displacement curves for the T-L configuration, (c) load-displacement curves for the L-T configuration (lines: simulations, symbols: experiments).

configurations. A very close agreement is obtained for the L-T configuration for both the load and the maximum crack advance. As shown in Fig. 14b, agreement is less satisfactory for the T-L case; this is attributed to delamination which causes a load drop and leads to a faster crack advance. In that case, bounds for the maximum crack advance have been estimated from the fractographic examination as shown in Fig. 7. Predicted crack advance lies between the bounds. The load simulated assuming that the material is not damaged is also shown in the graphs (thin solid line), showing that crack advance has, in that case, a significant effect on the overall behaviour of the specimen.

Values of the J integral have also been calculated from the simulation by applying the ASTM procedure to the

332

B. Tanguy et al. / International Journal of Pressure Vessels and Piping 85 (2008) 322–335

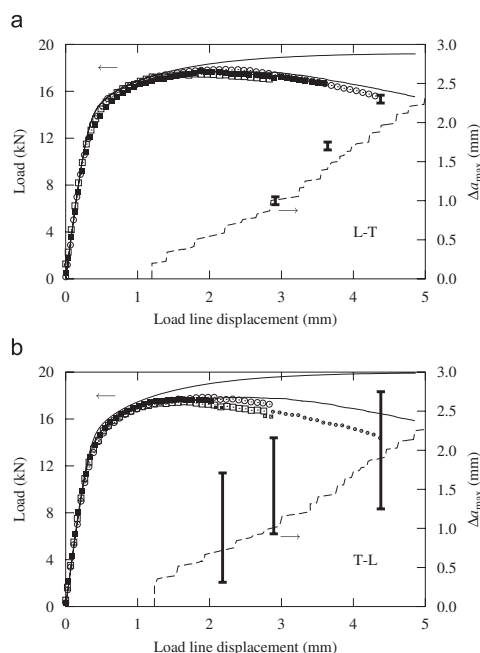


Fig. 14. Load and maximum crack advance vs load line displacement for C(T) specimens in the L-T (a) and T-L (b) configuration. Thick solid line: simulated load accounting for crack growth; thin solid line: simulated load not accounting for damage growth; dashed line: simulated maximum crack advance. Each symbol type represents an experimental load-displacement curve; the size of the symbols is reduced after delamination (T-L case only). The experimental range for the maximum crack advance is indicated by bars.

output of the simulation. As expected from Fig. 14, agreement with experiments is very good in the L-T case whereas the J integral is overestimated for the T-L case due to delamination.

6.6. Effect of plastic anisotropy on crack growth

The numerical tool presented in this study can also be used to make parametric studies on the model parameters, e.g. in relation with the development of new microstructures. Whereas, the effect of changing model parameters relative to damage growth or plastic hardening is obvious, the effect of plastic anisotropy on the overall behaviour of structures cannot be straightforwardly deduced. To illustrate this point, it was consequently assumed that the material plastic behaviour is isotropic and follows von Mises yield criterion.¹ The hardening behaviour is assumed to correspond to that

¹The yield condition proposed in the study can be used to describe isotropic yield surfaces which differ from the von Mises criterion (e.g. Tresca) with $c'_k = 1, \forall i, j$.

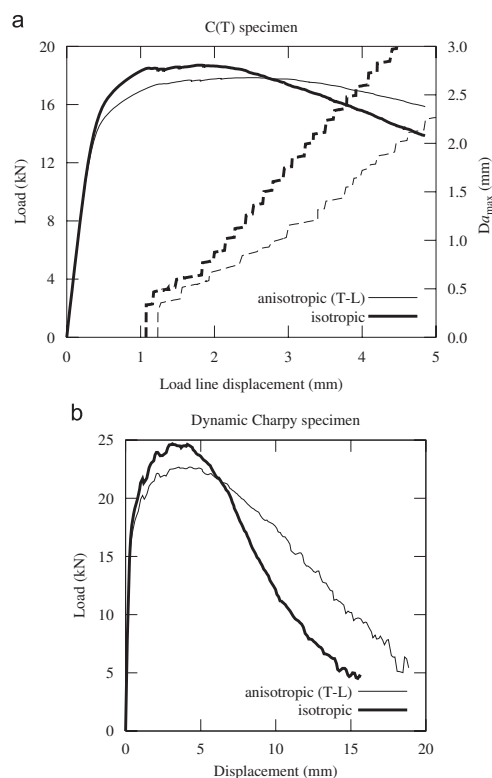


Fig. 15. Comparison of simulation for anisotropic material (thin lines) and "virtual" isotropic material (thick lines) for C(T) (a) and dynamic Charpy specimens (b). Solid lines correspond to load and dashed lines to maximum crack advance. In the case of the "virtual" isotropic material the hardening behaviour corresponds to the tensile behaviour in the T direction.

obtained in the T direction. The "virtual" isotropic material was used to simulate C(T) and impact Charpy specimens. Results are compared in Fig. 15 with simulation for the actual material in the T-L configuration.

It is observed that the maximum load is increased in the case of the isotropic material for both investigated geometries despite the fact the tensile behaviour coincides along the loading direction (T). Deformations of the samples ahead of the crack (or notch) tip differ depending on the yield criterion and different stress states are generated in the ligament. It is shown that the ratio σ_{kk}/σ_* is higher in the isotropic case so that the maximum load is increased; however, this also leads to a higher void growth rate, as this factor governs damage growth, so that load drop and crack advance are faster.²

²Note that using the stress triaxiality ratio defined as the ratio of the pressure over the von Mises stress is improper for an anisotropic material.

These results clearly indicate that assuming plastic isotropy would not allow to describe with the same set of model parameters tests carried out using different specimen types (tensile bars, NT bars, Charpy bars and C(T) along different directions. A preliminary study [54] has also shown that Hill's quadratic yield criterion [34] was also not sufficient (see also [29]). A purely isotropic model can be used to fit a reduced set of experiments corresponding to a single testing direction (e.g. smooth and notched bars tested along the L direction and C(T) specimens in the L–T configuration). Values of the Lankford coefficient must indeed not be considered. The GTN model must also be fitted for the selected direction as local values of the stress triaxiality ratio depend on the yield criterion. If the fit has to be carried out for a different direction, different values for the hardening rule and the GTN parameters will be obtained.

6.7. Delamination

Although brittle delamination was not modelled in this work, it can be inferred from the FE simulations of C(T) specimens that it reduces crack growth resistance as simulations overestimate the load compared to actual tests. It is believed that delamination is related to the band like structure observed in Fig. 1 and that it is controlled by the value of the stresses in the short transverse direction σ_{SS} . This hypothesis is supported by the fact that delamination is easier to trigger in side grooved C(T) specimens for which σ_{SS} is higher than for ungrooved C(T) specimens. The reason why delamination is more easily triggered in the T–L configuration than in the L–T configuration is however not clear as simulations show that the stresses in the short transverse direction reach similar values in both cases. One possibility to model delamination would be to use cohesive zone elements between solid elements to allow brittle opening in the S direction.

7. Concluding remarks

This study presents a material model describing plastic anisotropy and ductile damage including void nucleation, growth and final coalescence of a high strength steel used to manufacture X100 grade pipelines. Determination of material parameters and validation of the model rely on a set of mechanical tests and fractographic examinations. Laboratory tests were performed on smooth and notched tensile bars, plane strain, Charpy and C(T) specimens. Emphasis was put on characterisation of plastic anisotropy by testing tensile bars along the three main directions of the plate. L–T and T–L configurations were tested in the case of Charpy and C(T) specimens. This set of experiments was used to calibrate and validate a material model describing plastic anisotropy and ductile damage including void nucleation, growth and final coalescence. Finite element simulations were used to model experiments; due to anisotropy, full 3D calculations

were required. The material model provides an accurate description of plastic flow and crack growth as long as experiments do not exhibit brittle delamination which is observed for C(T) specimens in the T–L configuration. Results show that the material behaviour can be described using an anisotropic model for plastic flow but an isotropic model for damage growth. This is essentially due to the fact that inclusions at the origin of ductile damage (CaS, TiN, iron carbides and M–A islands) have isotropic shapes and are isotropically distributed. This is clearly not the case for “older” pipeline steels containing elongated MnS inclusions [48,55,56]. A better description could therefore be obtained taking into account void shape change. Depending on the stress triaxiality ratio voids tend to become prolate or oblate [49,56]. This effect could be enhanced in the case of a plastically anisotropic material as spherical voids subjected to an hydrostatic stress do not remain spherical in that case. To the authors' knowledge this problem has not been addressed in the literature.

Ongoing work focuses on modelling of slant fracture observed on plane strain tests which the model cannot represent although correct mean failure strains are predicted for these tests. Note that similar fracture path are observed on large scale burst tests, which makes the understanding and modelling of rupture processes important. Experimental results on C(T) specimens have indicated that delamination reduces resistance to ductile tearing. Coupling of ductile tearing and brittle delamination in the L–T plane could also be of some importance as this fracture mode was observed on dynamic ductile tearing tests [54,57] which are representative of pipeline fracture.

Acknowledgements

The authors thank Total, Gaz de France, Europepe and CEPM for financial support. The authors also wish to thank J.P. Jansen from Europepe, who provided the material of this study.

References

- [1] Okatsu M, Hoshino T, Amano K, Ihara K, Makino T, Kawabata F. Metallurgical and mechanical features of X100 linepipe steel. In: Toyoda M, Denys R, editors. Proceedings of the international pipe dream's conference, Yokohama, Japan; 2002. p. 263–72.
- [2] Hillenbrand H.-G., Liessem A, Biermann K, Heckmann C, Schwinn V. Development of high strength pipelines strength material and pipe production technology for grade X120 line pipe. In: International pipeline conference, Calgary, Canada, 4–8 October 2004, ASME, 2004.
- [3] Maxey W. Dynamic crack propagation in line pipe. In: Sih G, Mirabile M., editors. Analytical and experimental fracture mechanics. Rome; 1981. p. 109–23.
- [4] Wiedenhoff W, Vogt G, Peters P. Toughness requirements of large-diameter line pipe in gas transmission pipelines. In: International seminar on fracture in gas pipelines. Moscow; 1984. p. 95–117.

- [5] Civallero M, Mirabile M, Sih G. Fracture mechanics in pipeline technology. In: Sih G, Mirabile M, editors. Analytical and experimental fracture mechanics. Rome, 1981; p. 157–74.
- [6] Vogt G, Re G, Demofonti G. EPRG recommendation for crack arrest toughness for high strength line pipe steels. In: 9th biennial joint technical meeting on line pipe research. Houston: PRC/EPRG; 1993. p. 25.1–25.12.
- [7] Demofonti G, Mannucci G, Hillenbrand H.-G., Harris D. Suitability evaluation of X100 steel pipes for high pressure gas transportation pipelines by full scale tests. In: 14th joint technical meeting on pipeline research, EPRG-PRCI-APIA; 2003.
- [8] Pavankumar T, Samal M, Chattopadhyay J, Dutta B, Kushwaha H, Roos E, et al. Transferability of fracture parameters from specimens to component level. Int J Pressure Vessels Piping 2005;82:386–99.
- [9] Rice J. A path independent integral and the approximate analysis of strain concentration by notched and cracks. J Appl Mech 1968; 35:379.
- [10] Drubay B, Marie S, Chapuliot S, Lacire M, Michel B, Deschanel H. A16: guide for defect assessment at elevated temperature. Int J Pressure Vessels Piping 2003;80:499–516.
- [11] Priest A, Holmes B. A multi-test piece approach to the fracture characterisation of linepipe steels. Int J Fract 1981;17(3):277–99.
- [12] Turner C. A re-assessment of ductile tearing resistance. Part I: the geometry dependence of J - R curves in fully plastic bending. Part II: energy dissipation rate and associated R -curves in fully plastic bending. In: Fracture behavior and design of materials and structures. ECF 8; 1992. p. 933–968.
- [13] Turner C, Kolednik O. A micro and macro approach to the energy dissipation rate model of stable ductile crack growth. Fatigue Fract Eng Mater Struct 1994;17(9):1089–107.
- [14] O'Dowd N, Shih C. Family of crack-tip fields characterized by a triaxiality parameter—I. Structure of fields. J Mech Phys Solids 1991; 39(8):989–1015.
- [15] O'Dowd N, Shih C. Family of crack-tip fields characterized by a triaxiality parameter—II. Fracture applications. J Mech Phys Solids 1992;40(8):939–63.
- [16] Gullerud A, Dodds Jr R, Hampton R, Dawicke D. Three dimensional modeling of ductile crack growth in thin sheet metals: computational aspects and validation. Eng Fract Mech 1999;63:347–73.
- [17] Shterenlikht A, Hashemi S, Howard I, Yates J, Andrews R. A specimen for studying the resistance to ductile crack propagation in pipes. Eng Fract Mech 2004;71:1887–2013.
- [18] Brocks W, Scheider I, Schödel M. Simulation of crack extension in shell structures and prediction of residual strength. Arch Appl Mech 2006; 655–65.
- [19] Roychowdhury Y, Dodds Jr R. Ductile tearing in thin aluminum panels: experiments and analyses using large-displacement, 3-D surface cohesive elements. Eng Fract Mech 2002;69:983–1002.
- [20] Siegmund T, Brocks W. Prediction of the work of separation and implications to modelling. Int J Fract 1999;99:97–116.
- [21] Rice J, Tracey D. On the ductile enlargement of voids in triaxial stress fields. J Mech Phys Solids 1969;17:201–17.
- [22] Gurson A. Continuum theory of ductile rupture by void nucleation and growth: part I—yield criteria and flow rules for porous ductile media. J Eng Mater Technology 1977;99:2–15.
- [23] Tvergaard V. Material failure by void growth to coalescence. Adv Appl Mech 1990;27:83–151.
- [24] Rousselier G. Ductile fracture models and their potential in local approach of fracture. Nucl Eng Des 1987;105:97–111.
- [25] Gullerud A, Gao X, Dodds Jr R, Haj-Ali R. Simulation of ductile crack growth using computational cells: numerical aspects. Eng Fract Mech 2000;66:65–92.
- [26] Dotta F, Ruggieri C. Structural integrity assessments of high pressure pipelines with axial flaws using a micromechanics model. Int J Pressure Vessels Piping 2004;81:761–70.
- [27] Bron F, Besson J. Simulation of the ductile tearing for two grades of 2024 aluminum alloy thin sheets. Eng Fract Mech 2006;73: 1531–52.
- [28] Brunet M, Morestin F, Walter-Leberre H. Failure analysis of anisotropic sheet-metals using a non-local plastic damage model. J Mater Process Technol 2005;170:457–70.
- [29] Rivalin F, Besson J, Di Fant M, Pineau A. Ductile tearing of pipeline-steel wide plates—II: modeling of in-plane crack propagation. Eng Fract Mech 2000;68(3):347–64.
- [30] Brunet M, Morestin F. Experimental and analytical necking studies of anisotropic sheet metals. J Mater Process Technol 2001;112: 214–26.
- [31] Mackenzie A, Hancock J, Brown D. On the influence of state of stress on ductile failure initiation in high strength steels. Eng Fract Mech 1977;9:167–88.
- [32] AFNOR. Essai de flexion par choc sur éprouvette Charpy. Partie 1: méthode d'essai. Association française de normalisation. La Défense, France, 1990.
- [33] J. Besson. Mécanique et Ingénierie des Matériaux—Essais mécaniques—Éprouvettes axisymétriques entaillées. Hermès. 2001. p. 319–351.
- [34] Hill R. The mathematical theory of plasticity. Oxford: Clarendon Press; 1950.
- [35] Bron F, Besson J. A yield function for anisotropic materials. Application to aluminium alloys. Int J Plasticity 2004;20:937–63.
- [36] Barlat F, Lege D, Brem J. A six-component yield function for anisotropic materials. Int J Plasticity 1991;7:693–712.
- [37] Karafillis A, Boyce M. A general anisotropic yield criterion using bounds and a transformation weighting tensor. J Mech Phys Solids 1993;41:1859–86.
- [38] Tanguy B, Besson J, Piques R, Pineau A. Ductile–brittle transition of a A508 steel characterized by the Charpy impact test. Part-II: modelling of the Charpy transition curve. Eng Fract Mech 2005;72: 413–34.
- [39] Besson J, Steglich D, Brocks W. Modeling of crack growth in round bars and plane strain specimens. Int J Solids Struct 2001;38(46–47): 8259–84.
- [40] Ruggieri C, Panontin T, Dodds Jr R. Numerical modeling of ductile crack growth in 3-d using computational cell elements. Int J Fract 1996;82:67–95.
- [41] Enakoutska K, Leblond J, Perrin G. Numerical implementation and assessment of a phenomenological nonlocal model of ductile rupture. Comput Methods Appl Mech Eng 2007;196(13–16): 1946–57.
- [42] Mediavilla J, Peerlings R, Geers M. Discrete crack modelling of ductile fracture driven by non-local softening plasticity. Int J Numer Methods Eng 2006;66(4):661–88.
- [43] Thomason PF. A theory for ductile fracture by internal necking of cavities. J Insulat Metals 1968;96:360.
- [44] Besson J, Foerch R. Large scale object-oriented finite element code design. Comput Methods Appl Mech Eng 1997;142:165–87.
- [45] Simo J, Taylor R. Consistent tangent operators for rate-independent elastoplasticity. Comput Methods Appl Mech Eng 1985;48: 101–18.
- [46] Liu Y, Murakami S, Kanagawa Y. Mesh-dependence and stress singularity in finite element analysis of creep crack growth by continuum damage mechanics approach. Eur J Mech 1994;13A(3): 395–417.
- [47] Ladevèze P. Sur la théorie de la plasticité en grandes déformations. Technique Report. Rapport interne No. 9, LMT, ENS Cachan, 1980.
- [48] Benzerga A, Besson J, Pineau A. Coalescence-controlled anisotropic ductile fracture. J Eng Mater Technol. 1999;121:121–229.
- [49] Pardoën T, Hutchinson J. An extended model for void growth and coalescence. J Mech Phys Solids 2000;48(12):2467–512.
- [50] Devaux J, Gologanu M, Leblond J, Perrin G. On continued void growth in ductile metals subjected to cyclic loadings. In: Willis J, editors. IUTAM symposium on nonlinear analysis of fracture. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers. 1997. p. 299–310.
- [51] Besson J, Steglich D, Brocks W. Modeling of plane strain ductile rupture. Int J Plasticity 2003;19(10):1517–41.

- [52] Tvergaard V, Needleman A. An analysis of the temperature and rate dependence of Charpy V–Notch energies for a high nitrogen steel. *Int J Fract* 1988;37:197–215.
- [53] Rossoll A, Berdin C, Forget P, Prioul C, Marini B. Mechanical aspects of the Charpy impact test. *Nucl Eng Des* 1999;188(2):217–29.
- [54] Luu T. Déchirure ductile des aciers à haute résistance pour gazoducs (X100). PhD Thesis, Ecole des Mines de Paris; 2006.
- [55] Benzerga A, Besson J, Pineau A. Anisotropic ductile fracture. Part I: experiments. *Acta Mater* 2004;52:4623–39.
- [56] Benzerga A, Besson J, Pineau A. Anisotropic ductile fracture. Part II: theory. *Acta Mater* 2004;52:4639–50.
- [57] Rivalin F, Pineau A, Di Fant M, Besson J. Ductile tearing of pipeline–steel wide plates—I. Dynamic and quasi-static experiments. *Eng Fract Mech* 2000;68(3):329–45.

IV. Rupture par clivage des aciers

IV.1. Cadre général : modélisation statistique de la rupture fragile

La description de la rupture d'un matériau à comportement élastique linéaire dont la résistance est pilotée par son élément de plus faible résistance, répond à la théorie du maillon faible. Dans le cas d'un solide élastique renfermant une population de fissures aléatoirement réparties de type Griffith¹⁷ (eq.12), sa probabilité de rupture, P_f , peut être décrite par les relations 13 à 13c, où la probabilité élémentaire, $P_{f,0}$, est donnée par l'équation (13b). L'augmentation de la probabilité de rupture avec l'augmentation du volume sollicité, communément appelé *effet d'échelle*, est montrée par l'équation (13a). Dans le cas d'une sollicitation uniforme dans le volume V , la probabilité de rupture est donnée par l'équation (13c). La probabilité de rupture donnée par l'expression (13) est analogue à la probabilité de rencontrer au moins un défaut avec une résistance inférieure à σ_m dans un volume de densité de défauts $f(\sigma_m)$, $f(\sigma_m)$ est donc le nombre de défauts par unité de volume avec une résistance inférieure à σ_m .

$$\sigma^G = \sqrt{\frac{2E\gamma_{eff}}{\pi a(1-\nu^2)}} \quad (12)$$

$$P_f = 1 - \exp\left(-\int_V f(\sigma_m(\Sigma)) \frac{dV}{V_0}\right) \quad (13)$$

$$P_f = nP_{f,0} \quad (13a)$$

$$P_{f,0} = f(\sigma_m(\Sigma)) \frac{dV}{V_0} \quad (13b)$$

$$P_f = 1 - \exp\left[f(\sigma_m(\Sigma)) \frac{V}{V_0}\right] \quad (13c)$$

avec $\begin{cases} n = \text{le nombre de volumes élémentaires } V_0 \text{ dans le volume } V \\ P_{f,0} = \text{la probabilité de présence d'un défaut critique dans un volume } V_0 \end{cases}$

La forme suivante de $f(\sigma_m)$ a été proposée de façon heuristique par Weibull (Weibull, 1939; Weibull, 1951) :

$$f(\sigma_m) = \begin{cases} \left(\frac{\sigma_m - \sigma_{th}}{\sigma_u}\right)^m & \text{si } \sigma_m \geq \sigma_{th} \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (14)$$

L'expression de la probabilité de rupture pour une sollicitation non-uniforme résulte de la combinaison des équations (13) et (14) :

$$P_f = 1 - \exp\left(-\int_V \left(\frac{\sigma_m - \sigma_{th}}{\sigma_u}\right)^m dV\right) \quad (15)$$

où m est le module de Weibull, et σ_{th} et σ_u deux paramètres du modèle.

¹⁷Une fissure de type Griffith est une fissure dont la résistance à la propagation sous une contrainte appliquée peut être décrite par l'équation 12, autrement dit dont la propagation est pilotée par une contrainte critique.

On montre théoriquement que la distribution de Weibull est une des trois distributions asymptotiques de la théorie des distributions des valeurs extrêmes¹⁸ : le problème du maillon faible est équivalent à celui de la distribution des plus faibles valeurs dans un échantillonnage statistique de taille n . La théorie des valeurs extrêmes apparaît donc appropriée pour décrire l'évolution de la probabilité de rupture P_f . Le nombre de défauts dans les matériaux étant très important, et la partie supérieure de la distribution des tailles de défauts pouvant être approximée par une fonction puissance inverse, le choix de la distribution de Weibull se justifie directement.

La justification empirique du choix d'une distribution de Weibull pour décrire la rupture fragile des aciers a par ailleurs été montrée par sa capacité à décrire la dispersion des valeurs de ténacité (Landes and Shaffer, 1980).

IV.2. Modélisation physique de la rupture par clivage dans les aciers de structure

IV.2.1. Mécanismes de clivage dans les aciers de structure

La succession des différentes étapes menant à la rupture par clivage dans les aciers de structure est aujourd'hui communément admise et est le résultat de nombreuses études de métallographie 3D menées depuis les années 60 (par ex. (McMahon and Cohen, 1965; Lindley et al., 1970)). La rupture par clivage d'une microstructure polycristalline soumise à un champ de contrainte, est décrite en trois étapes successives (figure 20) :

1. germination d'une microfissure à partir d'une entité microstructurale (particule de seconde phase, inclusion, amas de carbures, amas d'inclusions),
2. propagation de cette microfissure dans la matrice environnante (grain),
3. propagation de la fissure à travers le joint de grain pour conduire à la rupture finale.

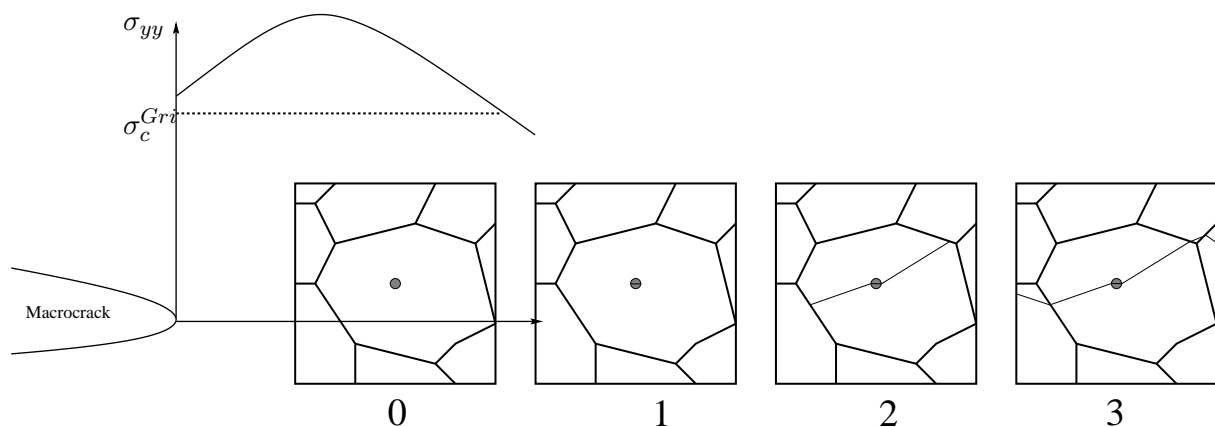


Figure 20: *Etapes menant à la rupture par clivage dans les aciers de structure.*

¹⁸Les trois classes de distributions des valeurs extrêmes minimales sont celles de Gumbel, Fréchet et Weibull.

Si la succession des étapes est généralement établie, les mécanismes physiques conduisant à la germination d'une microfissure et l'étape contrôlant la rupture finale par clivage (*étape critique*) ne font pas toujours consensus pour une microstructure donnée, et sont intimement liés à la microstructure considérée. Dans les aciers, les microfissures n'existent généralement pas avant sollicitation; quatre scénarios liés aux mécanismes de plasticité à froid peuvent être dégagés pour le processus de germination:

- rupture d'une particule fragile résultant de la microplasticité,
- rupture d'une particule fragile par déformation plastique de la matrice environnante ($\sigma_{max}^{part.} \sim \frac{l}{d} \sigma_{ecoulement}^{matrice}$ où l et d sont, respectivement, la longueur et le diamètre de la particule (Wallin, K. and Saario, T. and Törrönen, K., 1987)), (eq. 3 (Beremin, 1981))
- décohésion de particules ou de zones fragiles,
- amorçage d'une fissure résultant de la microplasticité (mécanisme de Stroh).

L'évolution des microstructures depuis 50 ans et, dans le cas des aciers bainitiques, la variabilité de ces microstructures, conduisent à l'implication de plusieurs types d'entités microstructurales associées à la germination d'une microfissure. Les carbures sont très souvent observés, notamment la cémentite (Fe₃C) dans les aciers doux ferritiques (McMahon and Cohen, 1965; Lindley et al., 1970; Oates, 1968), les carbures de fer (type M_XC_Y) dans les aciers à microstructure en lattes (Bowen et al., 1986; Gibson et al., 1991; Druce et al., 1992) ainsi que les carbures de titane (Gibson et al., 1991). L'implication des inclusions non-métalliques est reportée dans les études relatives aux zones affectées thermiquement (ZAT) des joints soudés (Zhang et al., 1986; Fairchild et al., 2000a) mais aussi dans les aciers de cuve bainitiques avec la présence de petites inclusions de MnS (Gibson et al., 1991; Rosenfield et al., 1983; Rosenfield and Majumdar, 1987; Mantyla et al., 1999) et de TiN¹⁹. Les amas d'inclusions de MnS ont également été impliqués dans l'amorçage de la rupture par clivage dans les aciers de cuve (Renevey, 1997; Mantyla et al., 1999; Rossoll et al., 2002).

Quelle que soit la nature des défauts à l'origine de la formation d'une micro-fissure, il faut se demander quel est l'évènement qui déclenche la rupture finale. Est-ce la création d'une micro-fissure dans une particule fragile? Ou est-ce sa propagation sur une distance caractéristique? Dans ce dernier cas, la propagation peut être stoppée par les hétérogénéités locales, ce qui souligne le rôle de la matrice environnante. La réponse dépend fortement de la microstructure impliquée et la nature de l'entité microstructurale qui contrôle la rupture n'est pas unique.

Les études pionnières (McMahon and Cohen, 1965; Oates, 1968) sur les aciers doux ferritiques ont *observé* que l'étape critique était la propagation d'une fissure amorcée dans un carbure de fer dans la ferrite environnante, cette propagation étant conditionnée par une contrainte critique. L'étape critique pour les microstructures bainitiques est encore largement discutée, en partie parce que les conclusions apportées sont déduites d'observations "indirectes" des mécanismes, via l'interprétation de la modélisation de type Griffith qui en est faite : La propagation de la microfissure née dans les particules de seconde phase est identifiée comme l'étape critique pour la bainite revenue (Gibson et al., 1991), le paquet bainitique est identifié comme contrôlant la propagation dans les bainites à très bas

¹⁹Dans ce type d'aciers, l'implication des MnS et des TiN est souvent faible devant celle des carbures de fer.

carbone (Brozzo et al., 1977; Bouyne et al., 1998), la propagation d'une fissure née dans d'une colonnie de carbures de fer est identifiée comme critique pour la bainite supérieure, où les carbures sont répartis en groupes (*colonnies*) dans la matrice ferritique (Zhang and Hauge, 1999).

Lorsque que les inclusions de type MnS et TiN sont identifiées à l'origine de la rupture, la fissuration de l'inclusion est reportée comme l'étape critique (Gibson et al., 1991; Fairchild et al., 2000b). Dans ce dernier cas, la rupture finale est donc contrôlée par le processus de germination des microfissures.

IV.2.2. Etude des mécanismes de clivage dans le bas de la transition sur les aciers de cuve

Dans les bainites, la finesse des entités microstructurales, notamment les carbures de fer, et le développement important de la plasticité pour certains cas de rupture, rendent particulièrement difficile la détermination des sites à l'origine du déclenchement de la rupture et posent la question de l'objectivité des observations fractographiques. Lors du travail de C. Bouchet, une démarche comparative entre plusieurs laboratoires nationaux et internationaux sur l'examen fractographique de mêmes faciès de rupture a été menée (Bouchet et al., 2005a)*. Les résultats obtenus ont notamment montré que lorsque le clivage s'amorce à partir de particules ou d'inclusions dans des éprouvettes où le clivage est déclenché pour des faibles niveaux de déformation plastique (éprouvettes Charpy, éprouvettes de ténacité), la concordance des observations est très bonne (identification et position du site). En revanche lorsque le clivage est déclenché après des niveaux de déformation plastique importants et implique des amas d'inclusions de MnS, l'accord se fait à une échelle mésoscopique (amas) mais la détermination précise du site est très difficile, ce qui rend délicate l'interprétation de l'étape critique ayant conduit à la rupture finale par clivage.

Nos observations fractographiques sur tous les aciers de cuve étudiés confirment le rôle des inclusions non-métalliques (TiN, MnS) (Tanguy et al., 2005b; Bouchet et al., 2007; Bordet et al., 2006a)* et des carbures de fer comme déclencheurs du clivage (figure 21). Cependant pour un grand nombre de nos observations (63% des cas pour l'acier 16MND5(2)), les micro-rivières de clivage convergent vers un joint de grain où aucune entité microstructurale particulière n'est observée. L'absence d'entité microstructurale particulière à l'origine de l'amorçage du clivage est également reportée dans la littérature (Bowen et al., 1986; Válka et al., 1997; Pluvinage and al., 1999). Un mécanisme de microplasticité est alors mis en avant pour expliquer la germination de la microfissure originelle. La compréhension de ce phénomène nous a conduit à mener une étude métallographique poussée sur ces sites "vides".

La finesse des entités microstructurales, notamment les carbures de fer dans les bainites, rendent particulièrement difficile leur observation. C. Bouchet a couplé l'utilisation d'un microscope électronique à balayage (MEB) à très fort grandissement à une attaque chimique du faciès de rupture. Cette démarche est illustrée pour l'acier 16MND5(2) sur la figure 22 où dans un site d'amorçage identifié comme "vide" avec un MEB classique, un carbure de fer est finalement identifié avec un grossissement plus important après une attaque au Nital. Une partie des sites étudiés a révélé la présence de carbures de fer, permettant de confirmer leur rôle dans le mécanisme à l'origine de la rupture par clivage dans ces aciers.

La présence d'amas de sulfures de manganèse au voisinage du déclenchement du clivage est également confirmée par nos observations. Cependant, il apparaît que l'implication de ce type de sites n'est jamais

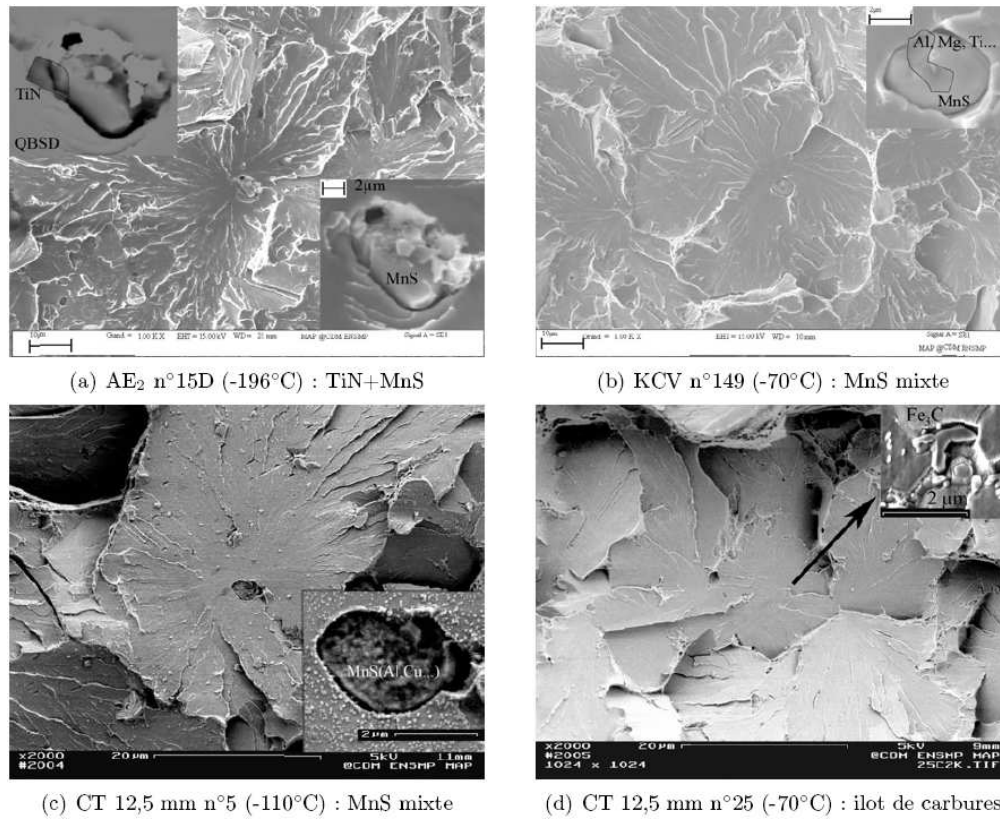


Figure 21: Exemples de particules à l'origine du déclenchement du clivage dans l'acier de cuve 16MND5(2) (Bouchet et al., 2007)*

observée sur les éprouvettes de type CT ou KCV (sur un total de 150 faciès observés), mais l'est dans les éprouvettes volumiques (de type NT) où le niveau de triaxialité est plus faible et qui nécessitent donc une déformation plus importante pour atteindre le niveau de contrainte nécessaire au déclenchement du clivage. Par ailleurs ces éprouvettes "activent" pour l'élaboration de la rupture un volume de matière plus important que pour les éprouvettes fissurées de type CT. Dans ce cas, le déclenchement du clivage se fait autour de l'amas, le site exact de l'amorçage étant très difficile à identifier, plusieurs sites pouvant même être à l'origine de l'amorçage. Les amas de MnS, lorsqu'ils sont associés à de l'endommagement ductile, doivent donc plutôt être appréhendés comme des amplificateurs de contrainte locaux qui vont échantillonner une population de défauts qui n'était pas *activée* avant l'apparition de l'endommagement ductile.

IV.3. Modélisation statistique de la rupture par clivage des aciers bainitiques

Un des objectifs des modélisations physiques proposées est de relier un paramètre local représentatif de la résistance à la rupture par clivage de l'entité microstructurale *critique* à l'évolution de la ténacité. La première modélisation déterministe reliant la ténacité à une grandeur caractéristique de la microstructure a été proposée par (Ritchie et al., 1973). Le modèle *RKR* proposé par Ritchie, Knott et Rice, est basé sur une étape critique de propagation dans la matrice environnante d'une microfissure de type Griffith amorcée dans une particule. Pour les éprouvettes fissurées, c'est à dire avec des forts gradients

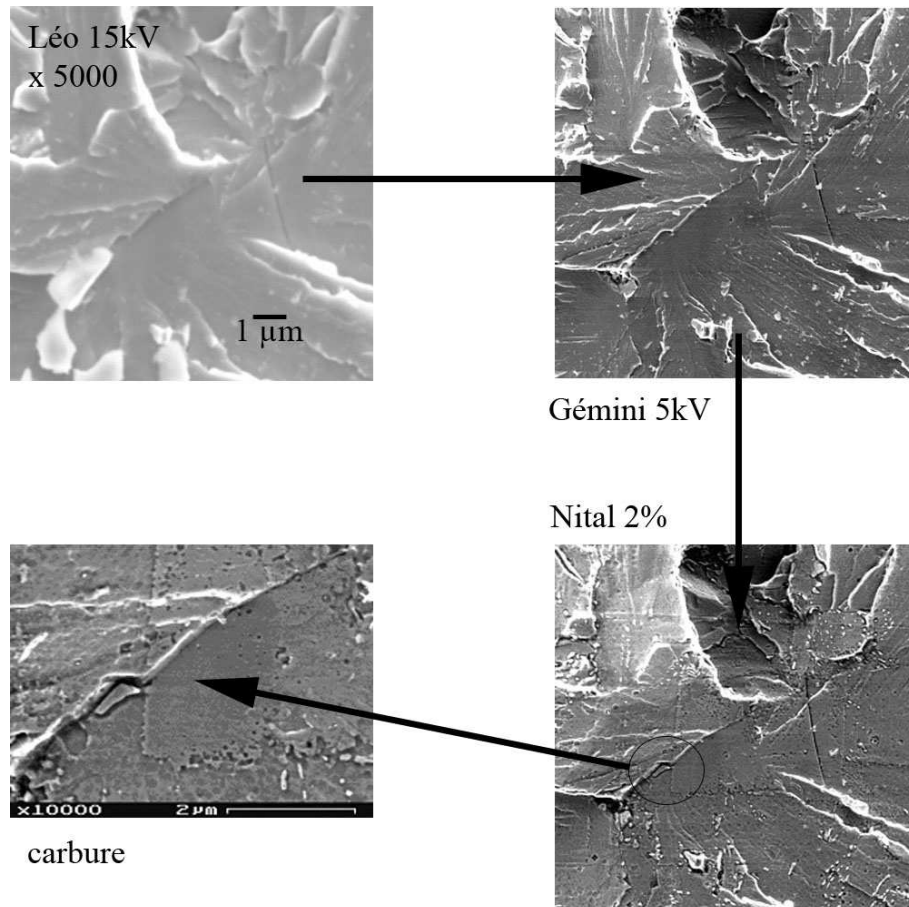


Figure 22: Mise en évidence d'un carbure de fer à l'origine du clivage sur un site initialement identifié comme "vide". L'utilisation d'un grandissement standard (x5000) utilisé pour la fractographie ne permet pas de révéler la particule (photos en haut). L'utilisation combinée d'une attaque chimique et d'un grandissement important (x10000) a été nécessaire pour révéler la particule au site de convergence des rivières de clivage (photo en bas à gauche). Acier 16MND5(2) (Bouchet et al., 2007)*.

mécaniques, il conduit à proposer un critère en contrainte de traction critique associée à une distance critique, l_c , sans interprétation physique simple, mais caractéristique de la présence d'un défaut critique en pointe de fissure (Curry and Knott, 1976). L'expression (16) du facteur d'intensité de contrainte critique est alors obtenue. Cette expression montre que la dépendance en température de la ténacité est issue de celle de la limite d'écoulement et du coefficient d'écroutissage.

$$K_{Ic} = \beta^{-\frac{N+1}{2}} l_c^{\frac{1}{2}} \sqrt{\frac{\sigma_c^{N+1}}{\sigma_0^{N-1}}} \quad (16)$$

$$\text{avec } \begin{cases} \beta & = f(N) \left[\frac{1-\nu^2}{\varepsilon_0 I_N} \right]^{\frac{1}{N+1}} \\ N, \varepsilon_0 & \text{définies par } \bar{\varepsilon}^p = \varepsilon_0 \left(\frac{\bar{\sigma}}{\sigma_0} \right)^N \end{cases}$$

La prise en compte de la distribution de taille des défauts répartis aléatoirement dans le volume plastifié conduit à une modélisation statistique du clivage (Pineau, 1981; Beremin, 1983; Evans, 1983; Mudry, 1987). Les modèles statistiques proposent une expression de la probabilité de rupture basée sur la théorie

du maillon le plus faible caractéristique des matériaux fragiles.

Ce type de modélisation permet de décrire l'évolution de la probabilité de rupture pour toute structure présentant une distribution statistique de microfissures, le cas des structures fissurées étant une des applications possibles de ce type de modèles. Un des modèles de référence, maintenant largement employé, y compris dans les normes, est celui de Beremin (Beremin, 1983; Mudry, 1987). L'expression proposée pour la probabilité de rupture repose sur plusieurs hypothèses :

1. (H1) On suppose que l'hétérogénéité microstructurale du matériau conduit à l'existence de microfissures dès l'apparition de la plasticité. Ces microfissures n'existent pas en dehors de la zone plastique. La population des microfissures créées n'augmente plus au cours de l'histoire des sollicitations.
2. (H2) La propagation instable d'un défaut répond à un critère de Griffith.
3. (H3) La contrainte principale maximale σ_I pilote l'instabilité du défaut²⁰.
4. (H4) La résistance à la rupture fragile du matériau peut être décrite par la théorie du maillon le plus faible.
5. (H5) La densité de probabilité de la distribution des tailles de défauts est modélisée par $p(a) = \frac{\alpha}{a^\beta}$.

L'expression du modèle de Beremin s'écrit :

$$\sigma_w = \left[\int_{V_p} \sigma_I^m \frac{dV}{V_0} \right]^{1/m} \quad P_R^B = 1 - \exp \left[- \left(\frac{\sigma_w}{\sigma_u} \right)^m \right] \quad (17)$$

avec σ_w la contrainte de Weibull, m , σ_u et V_0 les paramètres de la distribution des tailles de défauts, avec :

$$m = 2\beta - 2 \quad (17a)$$

$$\sigma_u = \left(\frac{m}{2\alpha} \right)^{1/m} \sqrt{\frac{2E\gamma_{eff}}{\pi(1-\nu)}} \quad (17b)$$

$$(\sigma_u)^m V_0 = cste \quad (17c)$$

Les hypothèses (H1) et (H2) conduisent à l'introduction implicite d'un seuil en contrainte dans l'équation 17. La propagation d'une fissure de type Griffith est conditionnée par l'écoulement plastique, c'est à dire pour une contrainte supérieure à la contrainte d'écoulement du matériau. La valeur de cette contrainte seuil montre donc une dépendance spatiale de la triaxialité des contraintes et de la déformation plastique.

La prise en compte de l'effet de la déformation plastique sur le clivage²¹ se fait en remplaçant la contrainte principale maximale par la contrainte effective, σ_{eff} , donnée par l'expression :

$$\sigma_{eff} = \sigma_I \exp \left(- \frac{\varepsilon_I}{k} \right) \quad (18)$$

²⁰Une contrainte effective, moyenne quadratique de la contrainte de traction et de la contrainte effective de cisaillement (Smith, 1966), est choisie comme critère par d'autres auteurs (Gibson et al., 1991).

²¹Cette modification représente la variation de la longueur d'une microfissure transverse dans un grain soumis à une déformation ε_I suivant la direction de la plus grande contrainte principale, σ_I .

où ε_I est la déformation totale dans la direction de la plus grande contrainte maximale, σ_I , et k est compris entre 2 et 4.

Les paramètres m , σ_u et V_0 ne sont pas indépendants et sont liés par la relation 17c. Ces paramètres ne varient pas avec la température si le mécanisme physique contrôlant le clivage reste identique.

A partir du modèle décrit par l'équation (17) avec $\sigma_I = \sigma_{Ip}$, où σ_{Ip} est la plus grande contrainte principale et de l'utilisation de l'expression des champs HRR²². pour décrire les champs mécaniques en pointe de fissure (plasticité confinée), une expression analytique (eq. 19) reliant la probabilité de rupture à la ténacité est proposée et a été appliquée avec succès pour prédire la ténacité d'un acier A508 dans le bas de la transition ductile–fragile, pour des niveaux entre 35 et $\sim 150\text{MPa}\sqrt{\text{m}}$ et des températures entre -196°C et 0°C (Beremin, 1983).

$$P_R(K_{Ic}) = 1 - \exp\left(-\left[\frac{K_{Ic}^4 B_f \sigma_0^{m-4} C_m}{\sigma_u^m V_0}\right]\right) \quad (19)$$

avec $\begin{cases} B_f & \text{la longueur du front de la fissure} \\ C_m & \text{constante numérique} \end{cases}$

L'effet de taille dans la distribution de la ténacité est pris en compte via B_f . La variation de K_{Ic} avec la température intervient uniquement via σ_0 avec les hypothèses émises. Pour une probabilité de rupture donnée dans l'expression 19), on obtient la relation 20 où l'effet d'échelle et la relation entre ténacité et limite d'élasticité, σ_0 , pour $m > 4$ (relation (20)) sont mis en évidence.

$$\sigma_0^{m-4} K_{Ic}^4 B_f = \text{Cste.} \quad (20)$$

La relation 19 étant issue de l'expression 17, elle possède également un seuil implicite en ténacité, en deçà duquel la rupture ne peut avoir lieu.

L'application du modèle original dans le cas de déchargements locaux, comme en arrière de la propagation de la déchirure ductile dans la transition ductile–fragile, pose le problème de la définition de la zone *active* pour calculer la probabilité de rupture P_R^B . La généralisation du modèle de Beremin à ces cas de trajet non-monotone²³, nous a conduit à introduire une condition de plasticité active dans le modèle (Tanguy et al., 2001; Tanguy, 2001)*. Dans l'équation (17), la contrainte σ_{Ip} est alors définie par :

$$\sigma_{Ip} = \begin{cases} \sigma_{eff} & \text{si } \dot{p} > 0, p > p_c \\ 0 & \text{autrement} \end{cases} \quad (21)$$

Dans le cadre du modèle de Beremin, qui repose sur un critère de propagation de microfissures pré-existantes, la relation 21 revient à considérer que la propagation d'une micro-fissure est conditionnée par une microplasticité active. Notons que dans le cas d'un trajet de chargement monotone, les modèles de Beremin et Beremin généralisé sont identiques. Cette condition de plasticité active a également été introduite par d'autres auteurs pour la prévision du clivage dans des travaux sur la modélisation de l'effet

²²HRR :Hutchinson, Rice et Rosengren (Rice and Rosengren, 1968; Hutchinson, 1968).

²³Le modèle de Beremin a été développé à l'origine dans le but de prédire la ténacité en chargement monotone.

de préchargement à chaud²⁴ (Lefevre et al., 2002). Cette condition trouve en partie son fondement dans les observations qui montrent qu'une microfissure qui ne s'est pas propagée immédiatement dans la matrice environnante ne participera plus au processus de rupture (McMahon and Cohen, 1965).

Notons également que cette écriture explicite de la plasticité active n'est plus nécessaire dans les modèles qui décrivent explicitement l'étape de germination de nouvelles microfissures au cours du chargement en fonction de la déformation plastique (Stöckl et al., 2000; Bordet et al., 2005) (voir le paragraphe sur les modifications des modèles de rupture par clivage).

IV.3.1. Identification des paramètres de la distribution de Weibull

La démarche d'identification des paramètres σ_u et m est basée sur l'utilisation de la méthode des moindres carrés, l'optimisation se faisant directement sur le couple $(m-\sigma_u)$ ²⁵. Pour un couple $(m-\sigma_u)$, la minimisation se fait directement sur la courbe $P_R = f(\sigma_W)$ sans passer par un logarithme. Les valeurs de m et σ_u sont obtenues par minimisation de l'écart entre les probabilités théoriques et les probabilités expérimentales. La méthode appliquée nécessite l'utilisation d'un estimateur de probabilité expérimentale. Plusieurs estimateurs existent dans la littérature (Khalili and Kromp, 1991), ils sont équivalents pour un grand nombre de résultats d'essais, N . Nous avons utilisé un des estimateurs les plus fréquemment utilisés : $P_R^i = \frac{i-0.5}{N}$. Cette méthode a été appliquée lors d'un round-robin européen (ESIS, 2000) où plusieurs techniques ont été confrontées. Pour une valeur m fixée, la valeur de σ_u est en accord avec celle obtenue par la technique du maximum de vraisemblance.

IV.3.2. Les modèles de Beremin et de Weibull sont ils forcément liés ?

L'obtention d'une distribution de Weibull (eq.17) dans le modèle de Beremin résulte directement de l'utilisation d'une loi puissance inverse pour décrire la distribution des tailles de microfissures. Nous avons utilisé une étude expérimentale de la littérature (Lee et al., 2002) où la distribution de taille des carbures de fer d'un acier de cuve proche de l'acier 22NiMoCr37 était identifiée à partir d'une large population (plus de 1400 particules) pour proposer une nouvelle expression de l'expression (17). A partir de la densité de distribution de taille donnée par la relation (22), la même démarche que celle utilisée pour dériver le modèle de Beremin conduit à l'expression (23) (Tanguy et al., 2003a)*.

$$p(\text{taille} > d) = \exp \left[- \left(\frac{d - d_u}{d_0} \right)^m \right] \quad (22)$$

avec d_u la taille des plus petits carbures observés, et d_0 et m les paramètres de la distribution de taille des carbures.

$$P_R = 1 - \exp \left(- \frac{V}{V_0} \exp \left[- \left(\frac{\frac{1}{\sigma_{pI}^2} - \frac{1}{\sigma_u^2}}{\frac{1}{\sigma_0^2}} \right)^m \right] \right) \quad (23)$$

La relation 23 montre que la dérivation de la probabilité de rupture à partir de données microstructurales conduit également à un seuil en contrainte : s'il n'existe pas de carbures critiques de taille supérieure à

²⁴Après avoir été chargée à une température où le clivage n'est pas actif, la fissure est déchargée totalement ou partiellement, refroidie à basse température, puis rechargée jusqu'à rupture.

²⁵D'autres méthodes, comme le maximum de vraisemblance (MLM), recommandé par l'ESIS (ESIS, 1997) ou la méthode des moindres carrés linéaires ($\ln(\ln(1/(1 - P_R))) = m \ln \sigma_W - m \ln \sigma_u$) peuvent être utilisées (Tanguy, 2001)*.

d_u alors la rupture ne sera pas déclenchée.

L'expression 23 est ensuite appliquée pour prédire la ténacité sur l'acier 22NiMoCr37. L'article cité, reporté à la fin de cette partie, montre que le modèle proposé prévoit correctement les valeurs expérimentales de la ténacité pour cet acier.

Par ailleurs nous avons montré dans cette étude l'importance d'une modélisation pertinente du comportement de la structure fissurée (loi de comportement, formalisme des grandes transformations, modélisation 3D des éprouvettes dans la transition fragile–ductile) pour décrire correctement les champs locaux mécaniques à la pointe d'une fissure, ces champs locaux étant utilisés pour *interpréter* les mécanismes physiques du clivage. La modélisation proposée dans (Tanguy et al., 2003a)* a ainsi permis de corriger une interprétation erronée de l'évolution avec la température de la taille critique des carbures à l'origine du clivage.

IV.3.3. Vers une description complète des mécanismes dans les modèles

Par construction le modèle de Beremin ne décrit pas l'étape de germination des microfissures dans le processus du clivage. L'hypothèse est que leur apparition est directement liée au volume plastique et à son extension. Des observations sur des éprouvettes de traction²⁶ ont montré que le nombre de particules fissurées augmente avec la déformation plastique. D'autres observations, sur des éprouvettes fissurées, ont montré que les sites d'amorçage du clivage pouvaient être situés entre la fissure macroscopique et le maximum du pic de la contrainte. Ces observations montrent que le processus de germination est un processus continu lié à une augmentation progressive de la déformation plastique. En conséquence, plusieurs modélisations, intégrant explicitement l'étape de germination, ont été proposées.

Parmi les modèles statistiques du clivage proposés, un premier ensemble de modèles s'est attaché à décrire explicitement la phase de germination du clivage, on citera :

- le modèle pionnier proposé par Stöckl (Stöckl et al., 2000) introduit la description de l'étape de germination en reliant le paramètre α de l'équation 17b à l'incrément de déformation plastique,
- le modèle de Margolin (Margolin et al., 1997) repose sur un critère de germination identique à celui proposé par (Beremin, 1981) (eq. 3) et sur un critère de propagation de la microfissure. Le caractère statistique du clivage y est introduit au travers de la contrainte de germination des microfissures qui est statistiquement distribuée,
- l'évolution du modèle WST²⁷ (Wallin and Laukkanen, 2008) décrit la germination d'une microfissure quand la contrainte dans cette particule, σ_{part} , donnée par $\sigma_{part} \sim \sqrt{\sigma_{yy} \times \varepsilon \times 1.3 \times E_{part}}$ avec ε la déformation de la matrice, atteint une contrainte critique,
- le modèle proposée par Kroon et Faleskog (Kroon and Faleskog, 2002) décrit l'effet de la germination par une correction linéaire de la contrainte principale maximale par la déformation plastique suivant le formalisme introduit par Beremin (Beremin, 1983). La correction apportée dans les deux modèles consiste à multiplier la contrainte principale maximale par un facteur

²⁶Pour ce type de sollicitation, la triaxialité des contraintes est constante avec l'augmentation de la déformation plastique tant que la striction n'est pas atteinte. Par conséquent son effet sur la germination des microfissures ne peut être déterminé avec ce type de géométrie.

²⁷Wallin, Saario, Törrönen (Wallin, K. and Saario, T. and Törrönen, K., 1984).

dépendant de la déformation plastique, cependant le mécanisme sous-jacent y est très différent. Pour le modèle de Beremin, elle est basée sur la modification de la longueur de la microfissure préexistante par la déformation et donc par la modification de la contrainte critique qui y est associée. Dans le cas du modèle de Kroon et Faleskog, il s'agit de décrire la germination continue des microfissures avec la déformation plastique. Les deux modifications ont d'ailleurs un effet inverse sur la contrainte principale maximale : la contrainte effective diminue avec l'augmentation de la déformation plastique (relation 18) dans Beremin, et la correction est de la forme $h_1(\varepsilon_e^p) \times h_2(\bar{\sigma}_1)$ avec $h_1(\varepsilon_e^p) = c\varepsilon_e^p$ et c positif dans le modèle de Kroon et Faleskog.

Un deuxième ensemble des modèles proposés est revenu à la description de la séquence d'étapes menant à la rupture finale par clivage illustrée sur la figure 20. Parmi ces modèles "multi-barrières", on citera :

- Le modèle déterministe proposé par Chen (Chen et al., 1997) qui propose une description du clivage à partir de trois critères : une déformation plastique critique, nécessaire pour créer une microfissure, une triaxialité des contraintes critique pour empêcher l'émoussement de défaut créé, et une contrainte critique, nécessaire pour propager la microfissure dans la matrice. L'application de ce modèle à un acier ferrito-perlitique montre que le critère qui contrôle la rupture finale varie en fonction de la température et de la géométrie du défaut macroscopique (entaille ou fissure).
- Le modèle statistique de (Martin-Meizoso et al., 1994) proposé pour décrire le clivage dans les aciers bainitiques qui introduit une description probabiliste de l'étape de germination de la microfissure, de l'étape de propagation de la microfissure à l'interface particule/matrice environnante et de l'étape de propagation à l'interface entre deux grains. Cette modélisation a été utilisée par (Lambert-Perlade et al., 2004) pour décrire le clivage dans un acier bainitique de construction pour lequel la capacité à arrêter des microfissures de clivage aux interfaces entre paquets bainitiques avait été mise en évidence expérimentalement. Pratiquement, l'application de cette modélisation complète du clivage reste très difficile car elle nécessite l'accès à des grandeurs locales tels que la ténacité à l'arrêt des différentes interfaces qui sont difficilement quantifiables.

Enfin, le modèle de Bordet (Bordet et al., 2005) qui permet avec un formalisme probabiliste de décrire le clivage comme la séquence d'un amorçage d'une microfissure dans une particule et de sa propagation *immédiate* dans la matrice environnante. Le formalisme de ce modèle qui n'introduit qu'un paramètre supplémentaire par rapport au formalisme de Beremin, a été utilisé dans l'étude post-doctorale de S. Bordet sur l'influence sur la rupture par clivage du préchargement à chaud de l'acier de cuve 18MND5.

A partir de l'écriture des probabilités conditionnelles²⁸ de la germination et de la propagation dans le formalisme du maillon faible, Bordet (Bordet et al., 2005) introduit une contrainte de Weibull modifiée donnée par l'expression :

$$\sigma_w^{*m^*} = \int_{V_p(\sigma_I > \sigma_{th})} \left(\int_0^{\varepsilon_p(t)} \frac{\sigma_{ys}}{\sigma_0^p} (\sigma_I^{m^*} - \sigma_{th}^{m^*}) (1 - P_{nucl}(t)) \frac{d\varepsilon_p}{\varepsilon_p^0} \right) \frac{dV}{V_0} \quad (24)$$

²⁸Le modèle de Bordet décrit ainsi les observations qui montrent qu'une microfissure de clivage qui ne s'est pas propagée immédiatement après sa germination, ne sera plus active dans le processus de rupture par clivage.

où σ_{ys}^0 est la limite d'élasticité à la température de référence T_0 , ε_p^0 est une déformation plastique de référence qui fixe le taux de germination des microfissures en fonction de la déformation plastique, $P_{nucl}(t)$ est la probabilité de germination des microfissures. Pour un chargement isotherme et une vitesse de déformation constante (cas des essais monotones de ténacité), $P_{nucl}(t)$ est donné par :

$$P_{nucl}(t) = 1 - \exp\left(-\frac{\sigma_{ys}}{\sigma_{ys}^0} \frac{\varepsilon_p(t)}{\varepsilon_p^0}\right) \quad (25)$$

La probabilité globale de clivage, P_R^* est écrite comme une distribution de Weibull :

$$P_R^* = 1 - \exp\left(-\left(\frac{\sigma_w^*}{\sigma_u^*}\right)^{m^*}\right) \quad (26)$$

La relation (24) introduit explicitement un seuil en contrainte, σ_{th} en deça duquel le clivage ne peut se déclencher. En plus de son intérêt dans le raffinement de la description des mécanismes physiques, l'introduction explicite d'un seuil présente également un intérêt mathématique en conduisant à des valeurs du paramètre m plus faibles qu'avec une distribution de Weibull à deux paramètres, ce qui "recentre" à droite la distribution des contraintes de Weibull²⁹, conformément aux données expérimentales (Hausild et al., 2005). L'identification de cette contrainte seuil est difficile à partir des résultats d'essais à rupture, car elle nécessite de très nombreux essais. Dans les études que nous avons réalisées, σ_{th} est évaluée à partir des examens fractographiques et de l'évaluation de la contrainte d'ouverture à rupture au site d'amorçage du clivage. Ainsi S. Bordet, dans son étude post-doctorale, a fixé une valeur de $\sigma_{th} = 1500$ MPa en deça de laquelle le clivage n'est pas déclenché. Une valeur de 1400 MPa est déterminée dans l'étude de C. Bouchet en accord avec les résultats de S. Bordet. Cette valeur de 1400 MPa, reportée également dans (Hausild et al., 2005; Chapuliot and Le Corre, 2008), semble corrélée au mécanisme du clivage transgranulaire dans les aciers de cuve.

Ce modèle (relation (26)) a été appliqué par S. Bordet dans son post-doc que j'ai co-encadré avec A. Pineau, sur l'étude de l'influence d'un préchargement à chaud (*WPS effect* pour Warm Pre-Stress effect) sur la rupture par clivage de l'acier de cuve 18MND5. L'effet WPS est particulièrement représentatif des cas de chargement où l'approche globale de la rupture ne peut s'appliquer. De nombreuses études, et notamment dans l'industrie électronucléaire (voir par ex. (Moinereau et al., 2007)*), ont mis en évidence expérimentalement deux choses : (i) un défaut de type fissure, qui a subi un chargement (K_{WPS}) en traction à une température (T_1) à laquelle le clivage n'est pas actif, ne pourra se propager si le trajet de chargement qui lui est appliqué ensuite est décroissant (ou constant) pendant la phase de refroidissement, même si ce trajet croise la courbe de ténacité du matériau, (ii) la fissure rechargée à basse température (T_2 , avec $T_2 < T_1$) conduit à une ténacité supérieure à celle obtenue par un chargement monotone à cette température (T_2). Classiquement, on explique cet effet par un émoussement de la fissure lors du préchargement, et par l'apparition de contraintes résiduelles de compression à la pointe de fissure lorsque celle-ci est déchargée; la prépondérance de chacun de ces mécanismes dépend du type de cycle WPS appliqué. En revanche l'effet de la prédéformation à chaud sur la modification éventuelle des mécanismes du clivage n'a été que rarement évoquée. Les objectifs de l'étude de S. Bordet étaient multiples. Il s'agissait : (i) de comprendre les modifications des mécanismes du clivage par une

²⁹Le seuil en contrainte implicite du modèle de Beremin ne permet pas ce recentrage de la distribution des contraintes de Weibull.

prédéformation plastique, d'autre part, (ii) de valider l'effet WPS pour des niveaux de chargement faibles et (iii) d'appliquer l'approche locale de la rupture à la prédiction des différents cycles de préchargement à chaud. Les principaux résultats et la méthodologie appliquée sont décrits dans l'article reporté à la fin de cette partie sur le clivage (Bordet et al., 2006a)* où une modification du modèle initial a été proposée afin de pouvoir l'appliquer au cas de chargement anisotherme. Ils ont également été décrits dans (Bordet et al., 2006b)*.

A partir d'essais monotones à rupture sur éprouvettes entaillées NT et sur éprouvettes fissurées (CT), le rôle prépondérant des inclusions de TiN dans le déclenchement du mécanisme de clivage est mis en évidence sur cet acier 18MND5. Les proportions relatives d'inclusions de TiN impliquées (90% sur NT, 55% sur CT) montrent, d'une part, que si une inclusion de TiN est présente dans la zone sollicitée, elle sera plus nocive qu'un carbure de fer (seulement 11% des particules impliquées sur CT) mais leur densité volumique étant plus faible³⁰ ces inclusions auront une probabilité plus faible de se trouver dans une zone sollicitée par une fissure. Lorsqu'un préchargement (prédéformation) est appliqué à une éprouvette "volumique" de type NT (c'est à dire où la probabilité d'échantillonner des inclusions de TiN est importante), cela va désactiver la population la plus nocive, pour l'acier 18MND5 les inclusions de TiN, la fissure amorcée dans ces particules ne pouvant se propager à la matrice environnante. Le déclenchement du clivage sera alors amorcé sur une autre population dont la densité volumique est beaucoup plus importante, les carbures de fer. La particularité des inclusions de TiN est une très bonne résistance de l'interface matrice-inclusion. Un chargement en traction de type "fibre-loading" conduit au clivage de l'inclusion avant que la déformation critique de décohésion ne soit atteinte. La forte résistance de l'interface est mise en évidence par le fait qu'un chargement en compression (jusqu'à un niveau de 40%) ne conduit pas à la décohésion de l'inclusion. Ces observations expérimentales justifient pleinement l'utilisation d'une modélisation multi-barrières du clivage pour rendre compte de l'effet de préchargement à chaud dans l'acier de cuve.

Plusieurs cycles entre la température ambiante et -150°C ont été étudiés :LUCF (Load-Unload-Cool-Fracture), LCF (Load-Cool-Fracture) et un cycle original LCIKF (Load-Cool with Increasing-K-Fracture) (fig. 23). Tous les essais ont vérifié le principe de conservatisme de l'effet WPS. Par ailleurs, les essais ont montré que : (i) pour un préchargement à chaud de $40\text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$, un effet WPS était obtenu, (ii) qu'une pente limite $-\Delta K/\Delta T$, dépendant du niveau de préchargement, devait être dépassée lors du cycle LICKF pour déclencher la rupture par clivage. Ce dernier résultat a renforcé le principe de conservatisme de l'effet WPS associé aux cycles à trajets décroissants ou constants (LCF).

A partir de la modélisation proposée des essais de ténacité, basée sur l'identification d'une loi de comportement permettant de décrire le comportement isotrope et cinématique de l'acier 18MND5, l'application du modèle statistique de Bordet permet une bonne description des valeurs de ténacité obtenues pour l'ensemble des trajets de chargement testés.

³⁰Une distance moyenne interparticule de $350\mu\text{m}$ a été mesurée pour les TiN et de $95\mu\text{m}$ pour les MnS (Osterstock et al., 2004)*.

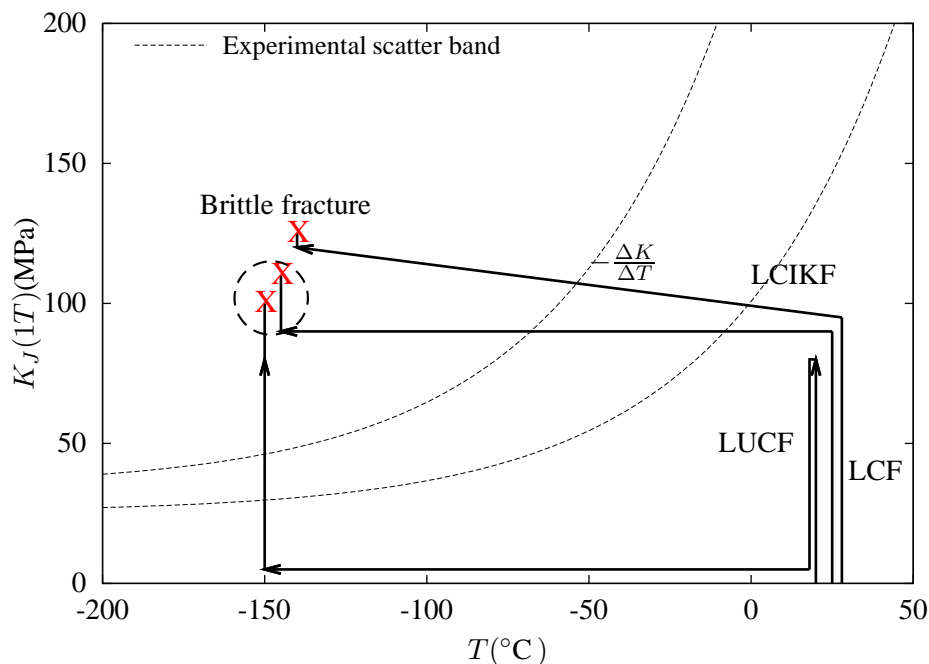


Figure 23: Cycles de préchargement à chaud étudiés dans l'étude post-doctorale de S. Bordet. LUCF (Load-Unload-Cool-Fracture), LCF (Load-Cool-Fracture), LCIKF (Load-Cool with Increasing-K-Fracture).

IV.3.4. Evaluation des modèles dans la transition fragile–ductile par la détermination du critère de rupture

Nous avons vu qu'une prise en compte de la germination des microfissures de clivage à partir des particules a été proposée par plusieurs auteurs afin d'enrichir les bases physiques de la modélisation du clivage. Le modèle de Bordet est ainsi bien adapté au cas du WPS, où l'effet d'une prédéformation plastique est susceptible de modifier les mécanismes du clivage à basse température. La comparaison des modèles de Beremin et de Bordet dans le cas de chargements monotones et isothermes pour prévoir la ténacité de l'acier 16MND5(2) dans la transition fragile–ductile³¹ ne montre pas de différences significatives dans la qualité des prévisions (Tanguy et al., 2006c)*. D'autres auteurs proposent d'introduire un critère mécanique supplémentaire qui fait intervenir la triaxialité (Chen et al., 1997). Cependant cet enrichissement se fait au détriment de la facilité d'utilisation du modèle, notamment à cause de l'introduction de paramètres supplémentaires à identifier. Il est donc important d'évaluer le critère de rupture le plus adapté au matériau étudié.

La détermination d'un critère de rupture a été étudiée dans le travail de thèse de C. Bouchet³² que j'ai co-encadré avec A. Pineau et J. Besson.

Ce travail consistait à étudier, dans l'acier de cuve 16MND5(2), l'évolution des mécanismes physiques du clivage dans la transition fragile–ductile. Une partie de cette étude (Bouchet et al., 2007; Tanguy

³¹Cette terminologie est utilisée pour désigner la rupture par clivage après des déformations plastiques importantes. La terminologie transition ductile–fragile est dédiée à la rupture par clivage après amorçage et propagation de la déchirure ductile.

³²La thèse de C. Bouchet n'a pas été soutenue suite à sa décision d'y renoncer pour des raisons personnelles. Un rapport final sur la base exhaustive d'essais mécaniques et d'examen fractographique a néanmoins été rédigé (Bouchet et al., 2007)*

et al., 2006c; Bouchet et al., 2006a)* a été consacrée à l'évaluation des champs mécaniques locaux au site d'amorçage du clivage, à l'instant de la rupture. L'acier 16MND5(2) de l'étude a été choisi avec une faible teneur en soufre (0.004 pds%) (voir tableau 1, chapitre II.) afin de s'affranchir de la présence des amas de MnS, qui peuvent perturber le mécanisme du clivage comme décrit dans les travaux de (Renevey, 1997; Carassou, 2000) sur une nuance 16MND5 avec une teneur en soufre deux fois plus importante.

Des éprouvettes entaillées (NT) et fissurées (CT) ont été utilisées dans cette étude. Trois rayons d'entaille ont été utilisés (voir fig. 15a) pour les éprouvettes NT pour obtenir différents niveaux de triaxialité des contraintes, et trois épaisseurs de CT ont été utilisées (12.5, 25, 50 mm) pour atteindre différents niveaux de confinement plastique pour une même température. Les éprouvettes NT sont testées entre -196°C et -40°C , les éprouvettes CT entre -120°C et -40°C . La première étape a été l'identification des sites à l'amorçage du clivage par une analyse fractographique de l'ensemble des faciès de rupture (soit 95 éprouvettes de géométrie CT et 119 éprouvettes de géométrie NT). Nous rappelons ici les principaux résultats des observations fractographiques :

1. Pour la géométrie NT, l'implication très importante des amas et des chapelets de MnS dans l'amorçage du clivage est mise en évidence, et ceci malgré la très basse teneur en soufre de la nuance étudiée. Le rôle des amas de MnS est fonction d'une combinaison de la température et du rayon d'entaille de l'éprouvette (voir figure 24).
2. Seules les combinaisons (NT₁, $T \leq -130^{\circ}\text{C}$), (NT₂, $T \leq -150^{\circ}\text{C}$) et (NT₄, $T \leq -150^{\circ}\text{C}$) conduisent à des amorçages où les amas de MnS ne sont pas impliqués.
3. Pour la géométrie CT, les amas de MnS ne sont jamais impliqués au site d'amorçage du clivage.
4. Le type d'amorçage le plus fréquent est celui sur un joint de grain (63% des sites d'amorçage). Il est particulièrement présent sur les éprouvettes fissurées.

Le premier résultat nous a conduit à nous interroger sur la sensibilité des paramètres m et σ_u du modèle de Beremin à ce changement de nature des sites d'amorçage avec la température dans les éprouvettes NT, et également sur la transférabilité des paramètres déterminés classiquement sur cette géométrie à différentes températures, à la géométrie fissurée, "macroscopiquement" fragile, mais faisant intervenir un mécanisme d'amorçage du clivage différent. Ce point sera traité à la fin de cette partie. A partir de l'analyse fractographique, les éprouvettes où les amas de MnS étaient impliqués ont été retirées de la base expérimentale pour laquelle les grandeurs mécaniques aux sites d'amorçage du clivage ont été déterminées. Les travaux de Chen (Chen et al., 1997) ont montré, sur un acier ferrito-perlitique, que la rupture par clivage pouvait être décrite par trois critères : une déformation plastique critique, ε_{pf} , nécessaire pour créer une microfissure, une triaxialité critique, τ_f , nécessaire pour empêcher que la microfissure ne s'émousse, et une contrainte critique, σ_f , nécessaire pour propager cette microfissure dans la matrice. Nous avons étudié l'évolution des grandeurs ε_{pf} , τ_f et σ_f en fonction de la géométrie de l'éprouvette et de la température de l'essai. Afin d'obtenir une bonne estimation de ces grandeurs, une attention particulière a été portée sur la loi de comportement utilisée et sur le raffinement du maillage en pointe de fissure (voir l'article (Tanguy et al., 2003a)* reporté à la fin de cette partie sur l'importance d'une modélisation rigoureuse, pour l'interprétation des mécanismes). La stratégie d'identification de la loi de comportement était identique dans toutes nos études. Les paramètres de la loi de comportement étaient

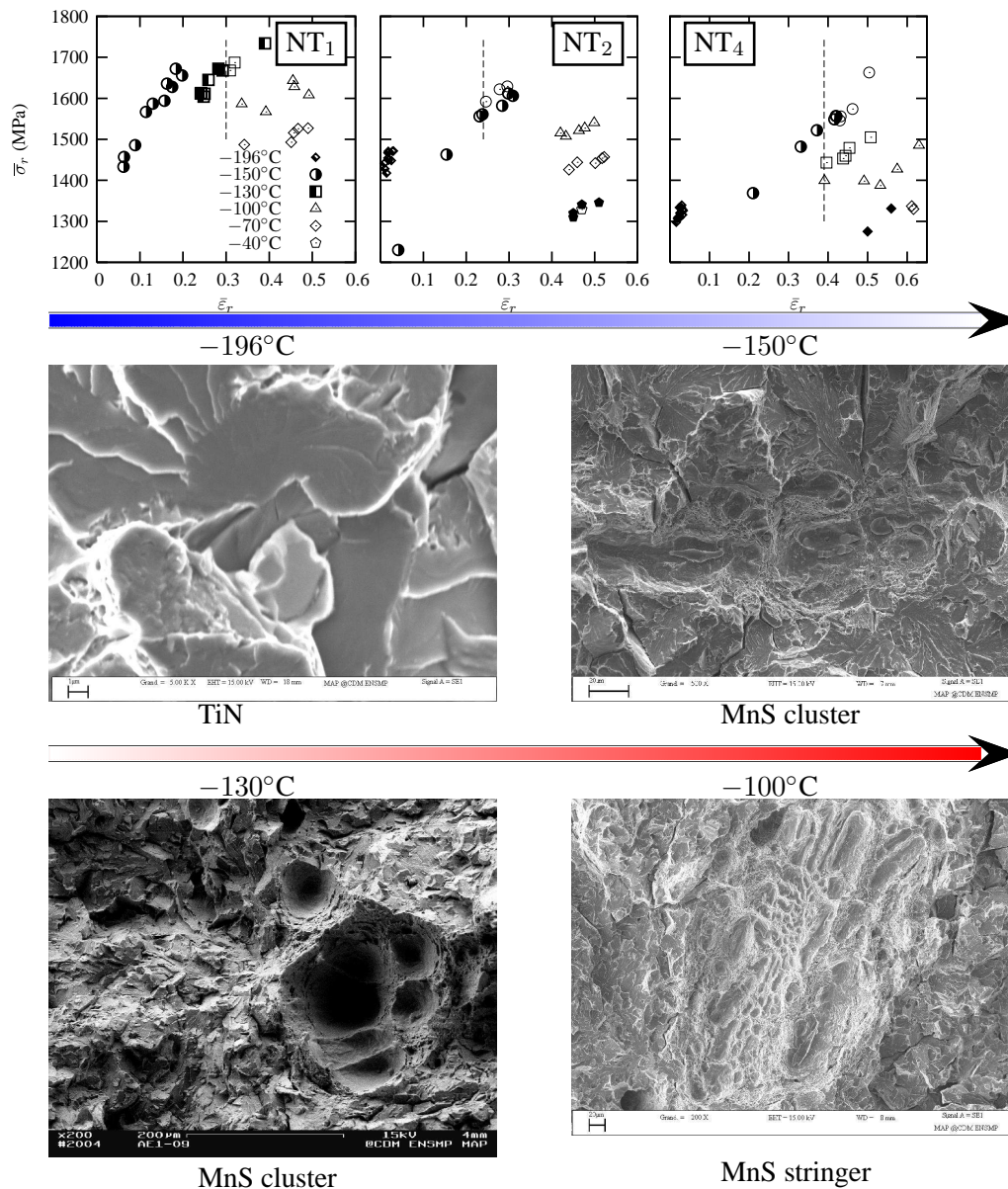


Figure 24: *Géométrie NT. Acier 16MND5(2). Evolution de la contrainte moyenne macroscopique à rupture en fonction de la déformation plastique équivalente à rupture, à différentes températures. Les symboles à moitié plein représentent les sites où les amas de MnS ne sont pas impliqués dans l'amorçage du clivage. Evolution du type de site d'amorçage avec la température (Bouchet et al., 2006b)*.*

déterminés à partir d'essais sur éprouvettes de traction lisses et de traction entaillées afin d'explorer une large gamme de déformation et de niveaux de triaxialité. Les essais de ténacité étaient simulés en utilisant la loi de comportement ainsi identifiée, et les courbes Charge-ouverture expérimentales et simulées étaient confrontées pour valider la loi. La figure 25 donne les grandeurs ϵ_{pf} , τ_f , σ_{If} calculées à la position des sites d'amorçage du clivage à l'instant de la rupture.

Un premier résultat important de cette étude, illustré sur la figure 25a, met en évidence une contrainte

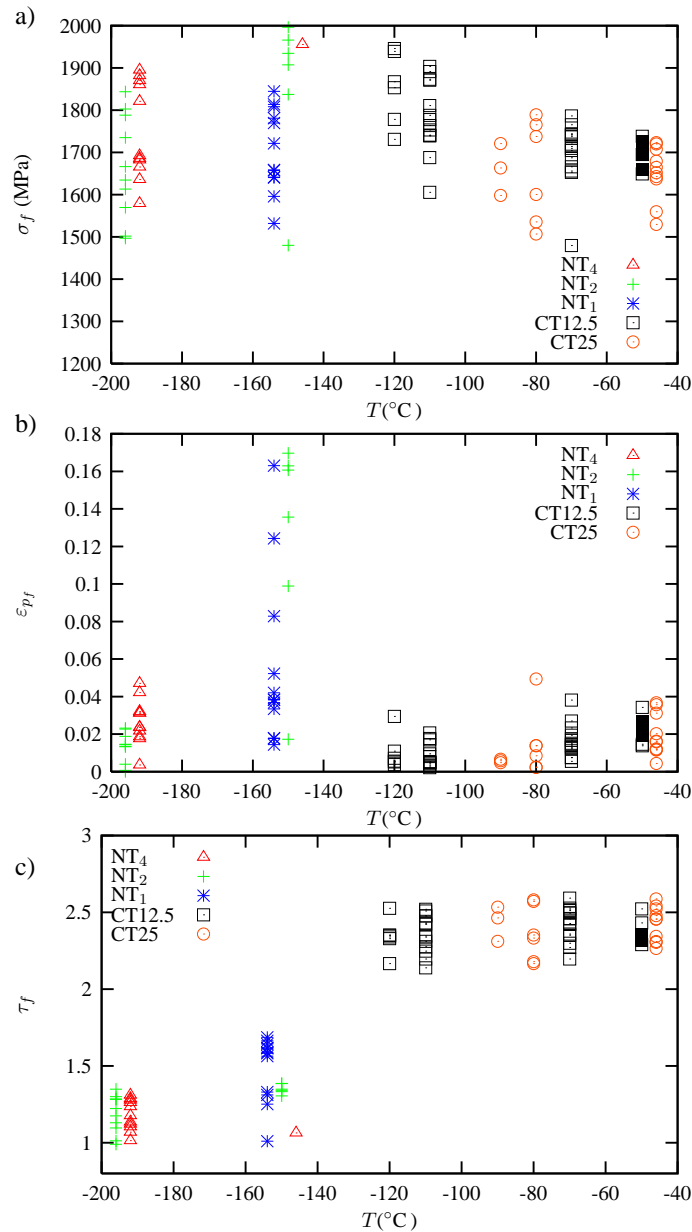


Figure 25: Acier 16MND5(2). Grandeurs mécaniques locales (σ_{I_f} , ϵ_{pf} , τ_f) aux sites d'amorçage du clivage et à l'instant de la rupture pour les géométries NT et CT en fonction de la température (NT_x, x inversement proportionnel à l'accuité de l'entaille. CT_Y, Y l'épaisseur de l'éprouvette).

seuil autour de 1400 MPa³³, pour toutes les géométries et sur toute la plage des températures, ce qui confirme qu'un niveau de contrainte critique est une condition nécessaire de la rupture par clivage, et conforte ainsi l'introduction d'un seuil en contrainte dans les modèles de clivage. De plus la contrainte moyenne $\bar{\sigma}_{I_f}$ apparaît indépendante de la température et de la géométrie. On remarque par ailleurs une dispersion plus importante de la contrainte σ_{I_f} sur la géométrie NT que sur la géométrie CT. Ce résultat est expliqué par le fait que, sur ce type d'éprouvette "volumique" et avec une triaxialité relativement

³³A partir d'un critère de Griffith (eq.12), cette valeur conduit à des énergies effectives de 5.6 et 14 J.m⁻² pour des particules de 1 et 5 μ m, respectivement.

faible, les contraintes d'ouverture sont quasiment les mêmes dans tout le volume, et elles augmentent avec le chargement, contrairement à une éprouvette fissurée où le profil des contraintes est quasiment constant au cours du chargement, mais où l'augmentation de ce dernier déplace le profil des contraintes, ce qui permet d'*échantillonner* un plus grand nombre de défauts. La dispersion des valeurs de contrainte peut donc être reliée à la dispersion de la taille des inclusions *actives* rencontrées³⁴. Quand on augmente la température, il faut plus déformer localement pour atteindre la contrainte critique (l'augmentation rapide de la déformation plastique conduit à une perte de confinement et donc à une baisse de la triaxialité locale), cette déformation va *désactiver* une partie des inclusions nocives à très basses températures, soit par décohésion, soit par arrêt et émoussement de la microfissure à l'interface particule–matrice. Sur ce type de géométrie, c'est donc le critère en contrainte qui pilote la rupture finale. Un résultat anecdotique (fig. 25b) est obtenu à -196°C sur la géométrie NT₂, où une valeur nulle de ε_{pf} est obtenue en un des sites d'amorçage du clivage. Le site correspondant a été identifié comme un joint de grain. On explique ce résultat par les incompatibilités de déformations plastiques entre les grains, qui induisent des contraintes élevées qui sont d'autant plus importantes que la température est basse et que la déformation mésoscopique est faible (Mathieu, 2006; Libert, 2007; Osipov, 2007). L'échelle d'analyse utilisée dans nos études ne permet pas de rendre compte des niveaux de contrainte lorsque les hétérogénéités intergranulaires de déformations et de contraintes sont marquées et vont jouer un rôle important dans le déclenchement du clivage. L'accès à ces champs locaux est possible à partir d'une analyse basée sur la plasticité polycristalline dans les microstructures bainitiques (Osipov, 2007). Le cas unique de déformation plastique nulle obtenu dans nos études justifie néanmoins une description homogène du milieu, du moins pour décrire les mécanismes de la rupture par clivage.

La faible évolution du paramètre τ_f pour la géométrie fissurée (figure 25c) montre que, sur ce type de géométrie avec une fissure profonde, le confinement de la plasticité est toujours préservé sur la gamme de températures étudiée. On observe par ailleurs une légère augmentation de la valeur moyenne du paramètre ε_{pf} avec la température pour cette géométrie.

Un deuxième résultat important est obtenu à partir de l'analyse de l'historique des grandeurs ε_p , $\ln(\varepsilon_p)$, τ , σ_I au cours du chargement à chaque site d'amorçage pour la géométrie fissurée. La figure 26a où l'on a reporté l'évolution de la déformation plastique en fonction de la plus grande contrainte principale jusqu'au moment de la rupture pour chaque site d'amorçage, met en évidence que le critère en contrainte est nécessaire mais pas suffisant pour déclencher le clivage.

Pour certains sites, la contrainte maximale est atteinte très tôt au cours du chargement, mais un certain niveau de plasticité semble nécessaire pour conduire à la rupture. La même analyse sur la géométrie entaillée montre que la contrainte est toujours croissante au moment de la rupture, ce qui implique que l'étape critique qui pilote le clivage sur les deux types de géométrie n'est pas toujours la même. On a reporté l'évolution du logarithme de la déformation plastique en fonction de la triaxialité sur la figure 26b, jusqu'au moment de la rupture pour chaque site d'amorçage. Les résultats reportés semblent indiquer que la rupture se produit lorsque l'état mécanique, en termes de déformation plastique et de triaxialité, se rapproche d'une courbe limite linéaire dans un diagramme $\ln \varepsilon_p - \tau$. Ce domaine limite ne semble pas dépendre de la température. Une fois cette limite atteinte, les variations de l'état mécanique se produisent le long d'une droite où la déformation plastique augmente et la triaxialité des contraintes diminue.

³⁴On met en évidence, à partir de l'équation de Griffith, qu'une taille d'inclusion qui varie de 2 à 5μ fait varier la contrainte à rupture, de 2100 à 1400 MPa pour une énergie effective de 14Jm^{-2} .

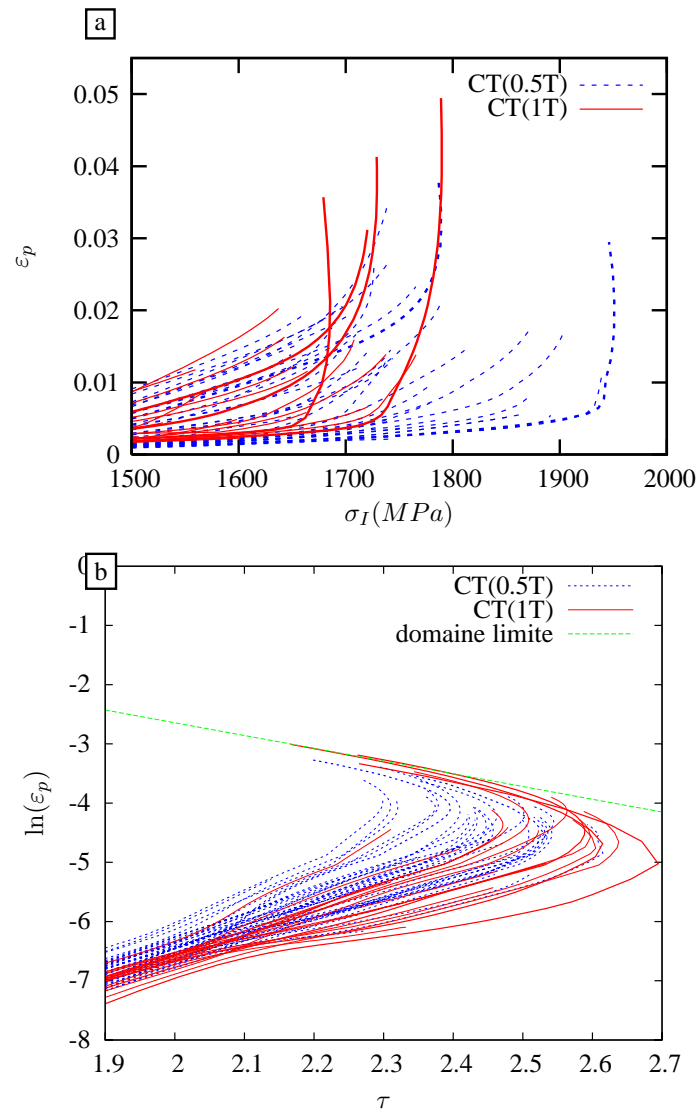


Figure 26: Evolution de l'état de chargement mécanique aux sites d'amorçage jusqu'au déclenchement du clivage pour les géométries fissurées : a) $(\varepsilon_p = f(\sigma_I))$, b) $\ln \varepsilon_p = f(\tau)$. Acier 16MND5(2).

Ces résultats indiquent que le critère de germination des microfissures devrait être formulé en termes d'une combinaison de la déformation plastique et de la triaxialité plutôt qu'en terme de déformation plastique uniquement. Afin de vérifier si ces résultats sont compatibles avec le critère de germination de microfissures proposé par (Beremin, 1981), où la contrainte dans une particule, σ_1^p (relation 3) est égale à $\Sigma_1 + \lambda'(\sigma_{eq} - \sigma_0)$ avec $\sigma_{eq} - \sigma_0$ qui dépend implicitement de la déformation plastique, l'évolution de la contrainte principale maximale en fonction de σ_1^p devra être tracée.

Il faut également souligner que des résultats proches ont été obtenus dans l'acier 22NiMoCr3-7 mentionné dans ce mémoire (Hohe et al., 2003; Hohe et al., 2004)* et (Hohe et al., 2006).

Quant aux mécanismes de clivage dans les éprouvettes fissurées, les perspectives de l'étude de C. Bouchet sont d'une part, de confirmer les rôles interdépendants de la déformation plastique et de la triaxialité des contraintes dans le mécanisme de germination des microfissures, et d'autre part de

confirmer que le critère de propagation est une condition nécessaire mais pas suffisante pour déclencher la rupture par clivage. A cette fin, une étude sur des éprouvettes avec des petites fissures a débuté avant mon départ du Centre des Matériaux et est actuellement menée dans le cadre d'un post-doc. Ce type de géométrie doit conduire à des pertes de confinement très tôt au cours de l'histoire du chargement et devrait permettre de valider ou invalider le concept d'une courbe limite proposé suite à l'étude de C. Bouchet. Récemment, les résultats obtenus dans (Hohe et al., 2003; Hohe et al., 2004)* (Hohe et al., 2006) ont été traduits sous forme d'un critère de germination en termes de distance critique par rapport à la courbe limite illustrée sur la figure 26b³⁵ (Hohe et al., 2008). Ce critère doit être testé sur l'acier 16MND5, qui présente une microstructure bainitique plus fine que l'acier 22NiMoCr37.

IV.4. Problématique de la transférabilité des paramètres entre géométries entaillée et fissurée

Les résultats obtenus à partir de la base expérimentale établie lors de l'étude de C. Bouchet semblent mettre en évidence que les conditions critiques d'amorçage du clivage ne sont pas toujours les mêmes entre la géométrie entaillée avec un fort effet de volume³⁶ et la géométrie fissurée. La présence des amas de MnS semble jouer un rôle très tôt et perturber la cinétique du déclenchement du clivage. L'effet d'un amas de MnS sur le clivage est assez difficile à appréhender et dépend fortement du développement de la déchirure ductile autour de celui-ci. Lorsque l'endommagement ductile est nul ou faible, il a été montré, à partir d'une simulation par éléments finis, que l'amas ne contribuait pas à augmenter la probabilité de rupture locale (Hausild et al., 2003). Certaines de nos observations fractographiques (fig. 27a) ont néanmoins montré que le clivage s'est amorcé au voisinage d'une grosse inclusion de MnS et d'autres que le clivage s'est amorcé entre deux amas de MnS, les amas jouant alors un rôle de concentrateurs de contrainte (Tanguy et al., 2005b; Tanguy, 2001)*. Le clivage est déclenché à une certaine distance de l'amas, sur la population de défauts potentiellement critique sans présence d'amas. Lorsqu'on a un développement d'une déchirure ductile autour de l'amas (fig. 27b), d'une part la répartition spatiale des contraintes est modifiée, et d'autre part la déchirure ductile augmente fortement localement le niveau de la contrainte maximale. Les observations fractographiques ont alors montré que les sites d'amorçage sont multiples et qu'ils sont localisés au niveau de la déchirure ductile.

Le modèle de Beremin a l'avantage de ne posséder que deux paramètres m et σ_u . On peut donc appréhender comment leurs valeurs seront modifiées par la présence d'amas de MnS. En supposant le paramètre m constant, on peut étudier comment le paramètre σ_u sera affecté si une modélisation qui ne prend pas en compte la présence des amas de MnS est utilisée pour représenter la rupture d'éprouvettes où les amas de MnS ont un rôle dans l'amorçage du clivage. Classiquement les déformations moyennes équivalentes à rupture des éprouvettes NT sont utilisées pour déterminer le paramètre σ_u . A partir d'une analyse par éléments finis classique, c'est à dire ne prenant pas en compte les amas de MnS et, donc ne prenant pas en compte l'augmentation de la plus grande contrainte maximale qui en résulte par un effet de concentration des contraintes, pour une déformation moyenne à rupture donnée, la valeur de la contrainte

³⁵Le critère de germination est donné par $\ln \varepsilon_p(x_i) \leq (m\tau(x_i) + b) - c$ où m et b dépendent du matériau et c est la distance critique.

³⁶Il semble que le cas de l'éprouvette Charpy soit différent de celui des éprouvettes NT, le volume actif qui répond à la fois aux conditions de contrainte et de plasticité, étant beaucoup moins important.

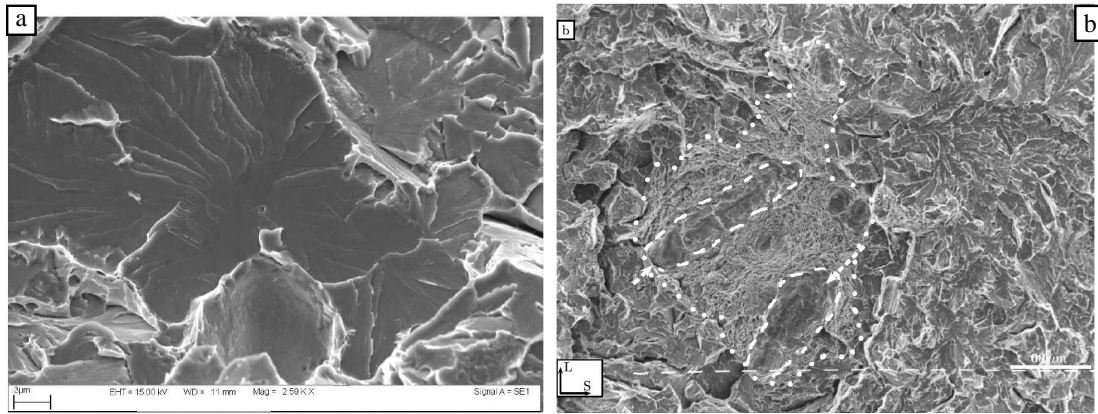


Figure 27: *Acier 16MND5(1). Déclenchement du clivage autour d'amas d'inclusions de MnS sur éprouvettes NT : a) déclenchement du clivage en avant de l'amas, sans déchirure ductile, b) déclenchement du clivage au droit de la déchirure ductile développée à partir de l'amas.*

de Weibull calculée par la relation ((eq. 17) sera plus faible que celle qui serait obtenue en modélisant la présence des amas de MnS. La valeur de σ_u est obtenue par optimisation, en égalant les probabilités de rupture (relation (eq. 17)) aux probabilités de rupture expérimentales. Pour une probabilité de rupture expérimentale donnée, une modélisation classique va donner une valeur du paramètre σ_u plus grande que celle représentative du matériau car dans l'expression (eq. 17) la valeur de σ_W est sous-estimée. L'application de la relation (eq. 17) avec une valeur de σ_u déterminée sur NT, à des géométries où les amas de MnS ne sont pas impliqués dans l'amorçage de la rupture, telles que les géométries fissurées, va donc conduire à une sous-estimation par la modélisation des probabilités à rupture expérimentales.

Cet effet a été obtenu lors de l'étude de la rupture par clivage des aciers 22NiMoCr37 et 16MND5(2) pour lesquels les amas de MnS jouent un rôle important dans l'amorçage du clivage pour la géométrie NT. Pour ces aciers, la détermination classique des paramètres m et σ_u à partir d'essais sur éprouvettes NT a conduit la modélisation proposée à surestimer l'évolution de la ténacité en fonction de la température pour une isoprobabilité donnée (Bouchet et al., 2006b; Tanguy et al., 2003b)*. En effet la relation (17) montre que pour atteindre une même probabilité de rupture, il faudra une contrainte de Weibull, et donc un chargement, d'autant plus important que le paramètre σ_u sera grand.

La détermination des paramètres m et σ_u à partir d'essais sur éprouvettes à "géométrie volumique" est donc affectée par la présence ou non d'amas de MnS jouant un rôle vis-à-vis du clivage.

Nous nous sommes en conséquence ensuite intéressés à la capacité de la distribution de Weibull à en rendre compte, et à mettre en évidence une bi-population dans le diagramme $P_R = f(\sigma_W)$.

Les paramètres du modèle de Beremin ont été déterminés à partir de la base expérimentale d'essais sur les géométries entaillées (NT). Les résultats obtenus sont reportés sur la figure 28, où la régression linéaire entre $\ln \ln(1/(1 - P_R))$ et le logarithme de la contrainte de Weibull est comparée aux données expérimentales (Bouchet et al., 2006b)*. Pour toutes les températures étudiées, la capacité de la distribution de Weibull à décrire les données expérimentales est montrée sur la figure 28a. Les valeurs de m et σ_u obtenues à partir des trois géométries d'entaille sont quasiment indépendantes de la température, alors que l'on passe d'une distribution de probabilités de rupture où les amas de MnS ont peu de rôle

(-150°C , voir fig. 24) à une distribution de probabilités de rupture où ils sont actifs (-130°C et -100°C). Par ailleurs, la figure 28b montrent que les valeurs de m et σ_u obtenues en considérant toute la base expérimentale d'essais sont similaires à celles obtenues par température d'essais. Ces résultats

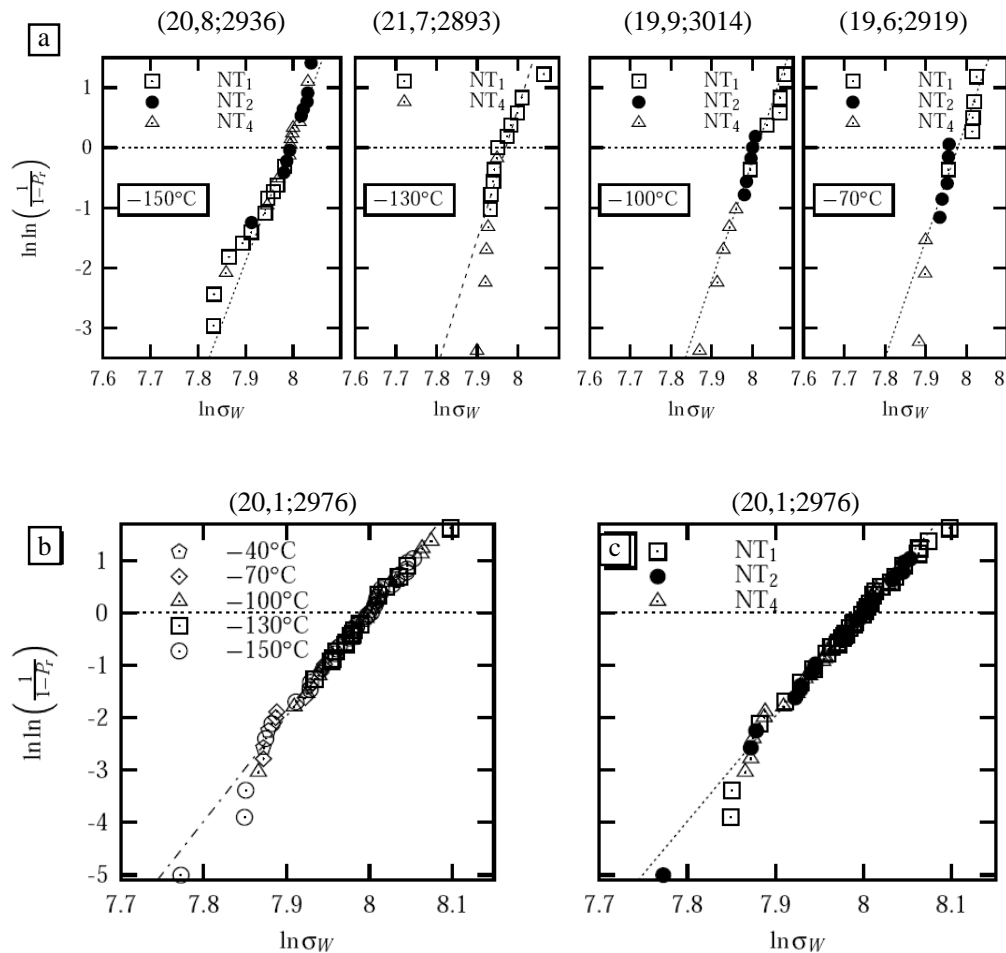


Figure 28: Distributions des probabilités de rupture en fonction de la contrainte de Weibull obtenues à partir d'essais sur éprouvettes NT pour l'acier 16MND5(2). Les couples $(m-\sigma_u)$ (MPa) obtenus sont reportés en haut de chaque figure : a) à différentes températures, en mixant les géométries d'entaille, b) et c) pour l'ensemble de la base expérimentale rangée par température d'essai (b) ou par géométrie d'entaille (c) (Bouchet et al., 2006b)*.

montrent qu'une simple analyse des paramètres m et σ_u ne permettra pas de mettre en évidence un rôle des amas de MnS dans l'amorçage du clivage.

La détermination des paramètres m et σ_u dans le but de prédire les probabilités de rupture des éprouvettes fissurées dans le domaine de la transition fragile-ductile pourrait se faire soit à partir d'éprouvettes "volumiques" mais à la condition d'avoir vérifié que les mécanismes physiques de rupture sont identiques sur éprouvettes "volumiques" et sur éprouvettes fissurées, soit à partir d'éprouvettes fissurées avec divers états de confinement de la plasticité, suivant la méthodologie développée dans (Gao et al., 1998).

IV.5. Conclusions

Les études réalisées ont montré la capacité des modèles utilisés pour prévoir la rupture par clivage des aciers. Le raffinement de ces modèles au cours des dernières années a permis de mieux décrire les différentes étapes menant à la rupture par clivage. L'introduction d'une modélisation plus fine du clivage a contribué à une meilleure description des résultats expérimentaux de ténacité de l'acier de cuve, tels que ceux obtenus après un préchargement à chaud. Cependant le raffinement des modèles est souvent obtenu au détriment de leur utilisation pratique. Au vu de nos résultats, le modèle de Bordet semble un bon compromis entre la description physique des mécanismes du clivage des aciers ferritiques et son utilisation pratique.

Par ailleurs nos résultats ont confirmé que l'approche locale pouvait être utilisée pour la prévision de la ténacité des aciers de cuve. Cependant, dans le bas de la transition ductile-fragile, les mécanismes de clivage entre la géométrie NT, utilisée dans l'étude originale de Beremin (Beremin, 1983), et la géométrie fissurée ne sont pas identiques. Cette différence de mécanisme résultant d'un changement de la mécanique et du volume sollicité entre les deux éprouvettes.

Concrètement, si cette méthodologie était envisagée en appui du programme de surveillance des centrales nucléaires, nous ne recommanderions pas de placer des éprouvettes NT dans les capsules de surveillance dans l'objectif de déterminer les paramètres de l'approche locale de la rupture, mais de continuer à utiliser les éprouvettes Charpy et CT.



PERGAMON

Available online at www.sciencedirect.com

Scripta Materialia 49 (2003) 191–197

www.actamat-journals.com

Comment on “Effect of carbide distribution on the fracture toughness in the transition temperature region of an SA 508 steel”

B. Tanguy *, J. Besson, A. Pineau

Ecole des Mines de Paris, Centre des Matériaux, UMR CNRS 7633, BP 87, 91003 Evry Cedex, France

Received 25 March 2003; received in revised form 10 April 2003; accepted 17 April 2003

Abstract

Critical cleavage stress values and carbide sizes obtained in a recent work by Lee et al. [Acta Mater. 50 (2002) 4755] are recalculated using 2D and 3D finite element simulations and new constitutive law, instead of small scale yielding assumption and likely improper choice for the behavior of SA 508 steel. A new model based on the weakest link concept with the determined carbide size distribution (CSD) is successfully applied to predict K_{Ic} measurements obtained on SA 508 steel and on a similar material (22NiMoCr3-7).

© 2003 Acta Materialia Inc. Published by Elsevier Science Ltd. All rights reserved.

Keywords: Toughness; Statistical model; Finite elements analysis

1. Introduction

This paper comments on a recent publication by Lee et al. [1] on cleavage fracture of SA 508 steel. Following Curry and Knott [2] who showed that the cleavage fracture toughness of a spheroidized steel depends on carbide distribution, most of the models for cleavage fracture of low alloy and mild steels are based on a statistical approach. Contrarily to mild steels, the full characterization of the carbide size distribution in quenched and tempered low alloy steels is difficult to obtain. This is why relevant experimental data are scarcely reported in the literature. In most of the carbide

induced cleavage fracture models it is assumed that the carbide size distribution follows an “a priori” function (see e.g. [3,4]).

Recently in a comprehensive study by Lee et al. [1] (hereafter referred to as Lee) the carbide size distribution (CSD) of an SA 508 steel, which is a quenched and tempered low alloy steel, was given based on the analysis of more than 1400 particules. Lee has investigated the effect of carbide distribution on the fracture toughness, K_{Ic} , of this material tested in the lower part of the transition temperature region where only cleavage fracture occurs without any prior ductile crack growth. Assuming that in this temperature range, cleavage fracture is controlled by a stress criterion and using the maximal principal stress profiles given by McMeeking [5] under plane strain small scale yielding (SSY) conditions, a linear relationship between the critical

* Corresponding author. Tel.: +33-1-60-76-30-61; fax: +33-1-60-76-31-50.

E-mail address: btanguy@mat.ensmp.fr (B. Tanguy).

carbide size initiating cleavage fracture and the test temperature was found. Based on this and on the relationship between the critical nearest-neighbour distance and the CSD, a deterministic relation was proposed between K_{Jc} and the CSD.

However in Lee's work anomalously large values for the critical cleavage stress were reported (see Table 3 in [1]) considering the mechanical properties of this material compared to those obtained on the same steel [3] and in a recent study on a very similar steel [6]. Moreover the SSY assumption for tests carried out on PCVN (Pre-cracked Charpy V-Notch) specimens tested at fracture toughness values as large as $150 \text{ MPa} \sqrt{\text{m}}$ (see Table 2 in [1]) appears to be strong.

Here, in order to comfort the results obtained by Lee [1], critical cleavage stress values have been recalculated based on the mechanical properties of SA 508 steel and using finite element (FE) calculations. Firstly the SSY assumption was kept in order to check the stress level values reported in Lee's work. Secondly, 3D numerical simulations of PCVN geometry were performed in order to validate the SSY assumption. Then, keeping the Lee's hypothesis that cleavage fracture in quenched and tempered bainitic steels is induced by carbides, and using the CSD obtained on SA 508 steel, a further extension of Lee's work is made to present a statistical model. This model follows the Beremin's formalism [3] but with the CSD given in Lee's work. Model parameters are adjusted to experimental results obtained on SA 508 steel with PCVN geometry and then applied to predict the K_{Jc} values of another quenched and tempered bainitic steel, 22NiMoCr3-7 material which is very close to SA 508.

2. Materials and experiments

Table 1 gives the chemical compositions of the investigated materials. Both were quenched and tempered. Full details can be found in [1].

Table 1
Chemical composition of SA 508 and 22NiMoCr3-7 steels (wt.%)

| Material | C | Si | Mn | P | S | Ni | Cr | Cu | Mo | V | Ta | Co | Al |
|-------------|------|------|------|-------|-------|------|------|------|------|-------|--------|-------|-------|
| SA 508 | 0.18 | 0.1 | 1.46 | 0.006 | 0.003 | 0.86 | 0.15 | 0.03 | 0.51 | 0.004 | – | – | 0.008 |
| 22NiMoCr3-7 | 0.22 | 0.19 | 0.89 | 0.007 | 0.007 | 0.87 | 0.40 | 0.04 | 0.55 | <0.01 | <0.005 | 0.011 | 0.019 |

Details on experiments performed on SA 508 steel are given in [1]. Here it is simply reminded that elastic–plastic fracture toughness, K_{Jc} , was determined using precracked Charpy V-Notch (PCVN) specimens ($10 \times 10 \times 55 \text{ mm}^3$) ($a_0/W \sim 0.5$). Static ($\dot{\epsilon} = 10^{-3} \text{ s}^{-1}$) tensile tests were performed on smooth specimens in 22NiMoCr3-7 material to determine the stress–strain curves at various temperatures. Static plane strain fracture toughness tests were carried out on CT(1T) specimens according to standard ASTM E 1921–97 with a nominal crack length to specimen width ratio (a_0/W) of 0.5. These specimens tested between -90 and $-30 \text{ }^\circ\text{C}$ led to pure cleavage fracture.

3. Results

3.1. Tensile properties

The evolution of the yield stress, σ_Y , and ultimate tensile stress, R_m , as a function of temperature is reported in Fig. 1a for both steels. The results concerning SA 508 steel are taken from [1]. As shown in Fig. 1, σ_Y and R_m are slightly lower for SA 508 steel than for 22NiMoCr3-7 steel. It is worth noting that at a given temperature, the difference between σ_Y and R_m is nearly the same between both steels, which indicates that the hardening capacity for both materials is quite similar over all the investigated temperature range.

The strain hardening exponent, n , in Ref. [1], was also given at different temperatures. However, the derivation of the function linking the flow stress and the plastic strain was not given in this paper. Assuming that the usual relation $\sigma_{eq} = K \times \epsilon^n$ was used by the authors and using the Considère criteria, from which the relation $R_m = K(n/e)^n$ is obtained, it is possible to determine the parameter K at each temperature (the same method was kept at $-196 \text{ }^\circ\text{C}$ where fracture

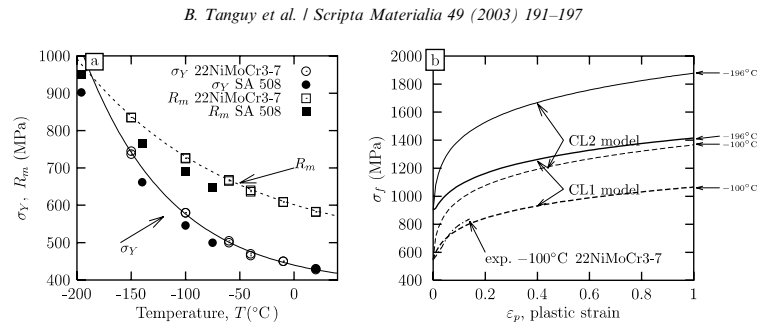


Fig. 1. Evolution of the tensile properties of SA508 and 22NiMoCr3-7 steels as a function of temperature. (a) Yield stress and ultimate tensile stress, (b) flow stress with CL1 and CL2 models.

occurred probably before necking) using the tensile properties given for SA 508 steel. Corresponding stress–plastic strain curves obtained at -196 and -100 °C are plotted in Fig. 1b (thick lines). These curves will be referred to as CL1 model in the following. On the same figure, the experimental stress–plastic strain curve for 22NiMoCr3-7 steel at -100 °C is also plotted. The stress–strain curves for both materials are very close. In the same figure, two other equivalent stress–plastic strain curves are also reported. These curves were obtained using the yield function given by McMeeking [5] (see Eq. (1)).

$$\left(\frac{\sigma}{\sigma_Y}\right)^{1/N} = \frac{\sigma}{\sigma_Y} + \frac{3E}{2(1+\nu)} \frac{\bar{\epsilon}_p}{\sigma_Y} \quad (1)$$

Here it is worth mentioning that the McMeeking's FE solutions were used by Lee to obtain the maximum principal stress, σ_{pl} , at each test temperature, and that these values were used to calculate the critical carbide size. This later point will be discussed in the following. Keeping the n values given in Ref. [1] (e.g. $n = N$ in Eq. (1)), and assuming that the Kirchoff stress tensor can be approximated by the Cauchy stress tensor, leads to much higher stress levels (thin lines on Fig. 1b referred to as CL2 model in the following) than stress–strain curves based on SA 508 tensile properties. In particular the ultimate tensile stress inferred from Eq. (1) is strongly overestimated at both temperatures. For simplicity's sake, results at other experimental temperatures (-140 and -75

°C) not shown here lead to the same conclusions were drawn.

3.2. Maximum principal stress, σ_{pl}^{max} , determination

3.2.1. SA 508 steel [1]

In Lee's work the σ_{pl} values at fracture (critical cleavage stress) were presumably obtained at each test temperature by using the McMeeking's FE solutions [5] with CL2 model. Based on the critical stress obtained for 22NiMoCr3-7 and A508 steels with CT(IT) geometry [6], it appears that the stress values indicated in Lee's work are anomalously high, especially when considering that they were obtained with a PCVN geometry [7]. It is reminded that the results presented by McMeeking are based on a SSY assumption, plane strain analysis, and imposing an asymptotic dependence on mode I elastic crack-tip singular field (for more details see [5]). Similar calculations to those presented by McMeeking were made in our study but using the tensile stress–plastic strain curves inferred from the material data given by Lee (labelled CL1).

FE simulations were performed using software Zébulon [8]. Quadratic elements (eight nodes) with reduced integration were used. The boundary layer radii were modified in order to verify SSY conditions varying from 6 to 225 mm for K_{Ic} values included between 36.3 and 150 MPa \sqrt{m} .

σ_{pl} profiles corresponding to the experimental K_{Ic} values given by [1] are reported in Fig. 2a. This stress reaches a maximum at a distance, X_c . In

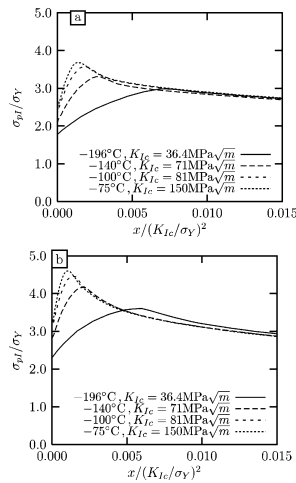


Fig. 2. Maximal principal stress profiles obtained in SSY conditions for SA 508 steel (a) with CL1 model, (b) with CL2 model.

Fig. 2b, the stress profiles corresponding to CL2 model are reported. The maximum values of σ_{pl} for each experimental K_{Ic} value are given in Table 2 where the values reported by Lee are also given.

From these results, two main conclusions can be drawn: (i) The maximum principal stress, σ_{pl}^{max} , values reported by Lee are much higher than those obtained from simulations with SSY assumption using the stress–strain curves of SA 508 steel (CL1 model). (ii) The σ_{pl}^{max} values reported by Lee are very close to those obtained from simulations with SSY assumption using CL2 model. Similar values are obtained, except at -196°C were simulations give lower values. From these results it is inferred

that the results presented by Lee were obtained using CL2 model as constitutive law for SA 508. Based on Fig. 1b, it appears that this hypothesis leads to stress levels much larger than those expected from the material properties. It is then concluded that the σ_{pl}^{max} values reported in Lee's work were largely overestimated, and, that the critical carbide sizes calculated from these values were overly underestimated.

Plane strain and full 3D simulations of PCVN specimens were also performed. σ_{pl}^{max} values are reported in Table 2 while σ_{pl} stress profiles obtained at each test temperatures are shown in Fig. 3. It is observed that when the test temperature is higher than -100°C , the SSY assumptions are no longer valid. This result is observed for both plane strain and 3D simulations. Therefore the σ_{pl}^{max} value is lower than that predicted from SSY assumption.

3.2.2. 22NiMoCr3-7 steel

In order to determine the σ_{pl}^{max} values corresponding to the K_{Ic} values obtained with this steel, 3D simulations of CT(1T) tests were performed. A good agreement between experimental and simulated load–CMOD curves were obtained at different temperatures. The calculated values of σ_{pl}^{max} are reported in Table 3.

3.3. Determination of the critical parameters

Based on the obtained values for σ_{pl}^{max} and keeping the Lee's assumptions according to which cleavage fracture is stress controlled by the propagation of a microcrack located through the carbides thickness, the critical carbide sizes was

Table 2

Comparison between maximum principal stress values, (σ_{pl}^{max}), obtained with small scale yielding assumption (SSY) and full 3D simulations of PCVN tests using two different constitutive laws (CL1 and CL2)

| | σ_{pl}^{max} (MPa) | | | |
|---------------------|---------------------------|----------------------|----------------------|---------------------|
| | -196°C | -140°C | -100°C | -75°C |
| SSY, Lee et al. [1] | 3770 | 2866 | 2441 | 2235 |
| SSY + CL1 | 2694 | 2192 | 1954 | 1844 |
| SSY + CL2 | 3251 | 2757 | 2437 | 2302 |
| PCVN 3D + CL1 | 2730 | 2168 | 1908 | 1785 |

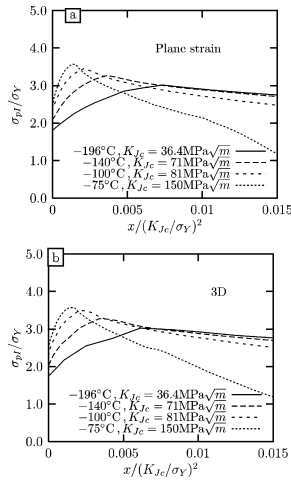


Fig. 3. Principal stress profiles in the mid-section of a PCVN specimen corresponding to the experimental fracture toughness values for SA 508 steel. (a) Plane strain, (b) 3D simulations.

Table 3
Maximal principal stress (σ_{pl}^{max}), distance (X_c) from precrack tip to location of maximum principal stress, critical carbide size (d_c)

| | T (°C) | σ_{pl}^{max} (MPa) | X_c (mm) | d_c (μm) |
|--------------------|--------|---------------------------|------------|-------------------|
| <i>SA 508</i> | | | | |
| 3D (plane strain) | -196 | 2730 (2716) | 0.0099 | 0.287 |
| | -140 | 2168 (2160) | 0.038 | 0.448 |
| | -100 | 1908 (1885) | 0.047 | 0.573 |
| | -75 | 1785 (1745) | 0.125 | 0.650 |
| <i>22NiMoCr3-7</i> | | | | |
| Plane strain | -90 | 1746 | 0.0148 | 0.702 |
| 3D | -90 | 1829 | 0.0246 | 0.64 |
| | -60 | 1740 | 0.0306 | 0.702 |
| | -60 | 1760 | 0.08 | 0.686 |
| | -30 | 1723 | 0.081 | 0.711 |
| -30 | 1700 | 0.1021 | 0.731 | |

calculated by the authors [1] using a modified Griffith equation given by:

$$d_c = \frac{4E\gamma_p}{\pi(1-\nu^2)(\sigma_{pl}^{max})^2} \quad (2)$$

where γ_p is the effective surface energy (equal to 7 J/m² in Lee's work), ν is the Poisson's ratio. The calculated results based on PCVN specimens simulations using the constitutive equation CL1 for SA 508 steel and experimental tensile stress–plastic strain for 22NiMoCr3-7 steel are reported in Table 3. σ_{pl}^{max} values obtained with both plane strain and 3D simulations are reported in Table 3 for SA 508 steel. These results show that the σ_{pl}^{max} values obtained from 3D simulations are very close to those calculated from plane strain assumption. The evolution of the critical carbide sizes with temperature is reported in Fig. 4 where Lee's results are also included. As already indicated by Lee for SA 508 steel, the critical carbide size, d_c , increases linearly with increasing test temperature, but for SA 508 steel the values obtained in the present study are higher due to the lower σ_{pl}^{max} values obtained. Referring to the CSD given by Lee, at the highest test temperature, a very few number of the carbide particles will be eligible to participate to the nucleation of microcracks. Results obtained for 22NiMoCr3-7 steel tested at higher temperature show a weaker temperature dependence of the critical carbide size. However it is observed that at similar temperature (~ -80 °C), both materials lead to similar values for the critical size of carbides particles ($\sim 0.7 \mu m$), as expected due to the similarity of these materials.

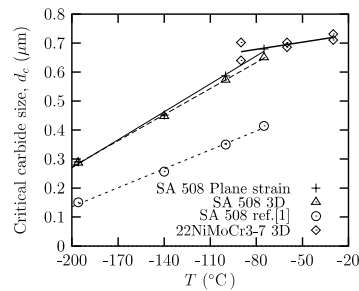


Fig. 4. Critical carbide size (d_c) vs test temperature for SA 508 steel and 22NiMoCr3-7 steel.

4. Statistical model

Lee showed that the probability of finding carbides larger than a given size, d , is given by:

$$P(\text{size} > d) = \exp \left[- \left(\frac{d - d_u}{d_0} \right)^m \right] \quad (3)$$

with $d_u = 0.00917 \mu\text{m}$, the size of smallest carbides observed, $d_0 = 0.10158 \mu\text{m}$ and $m = 1.192$, the shape factor of the Weibull distribution.

Assuming that a carbide can lead to the nucleation of a microcrack as soon as plasticity occurs [9], the microcrack size distribution can be represented by the CSD. Fracture occurs when, for a given local stress, σ_{pl} , the carbides size is greater than a critical value, d_c . The value of d_c can be linked to a local fracture toughness, k_{Ic} by the following formula:

$$d_c \sim \frac{1}{\pi} \left(\frac{k_{Ic}}{\sigma_{pl}} \right)^2 \quad (4)$$

Using Eq. (3), the corresponding failure probability is:

$$P_r = \exp \left[- \left(\frac{d_c - d_u}{d_0} \right)^m \right] \quad (5)$$

Using a statistical analysis similar to that one proposed by Beremin [3], it can easily be shown that the failure probability is given by:

$$P_R = 1 - \exp \left(- \frac{V}{V_0} \exp \left[- \left(\frac{d_c - d_u}{d_0} \right)^m \right] \right) \quad (6)$$

(where V is the stressed volume) or expressed in terms of stress as:

$$P_R = 1 - \exp \left(- \frac{V}{V_0} \exp \left[- \left(\frac{\frac{1}{\sigma_{pl}^2} - \frac{1}{\sigma_u^2}}{\frac{1}{\sigma_0^2}} \right)^m \right] \right) \quad (7)$$

where $\sigma_0 \sim (1/\pi^{1/2})(k_{Ic}/d_0^{1/2})$. In Eq. (6), the carbide size threshold, d_u , is equivalent to the introduction of a stress threshold, σ_u , such that $d_u \sim (1/\pi)(k_{Ic}/\sigma_u)^2$. This expression leads to $P_R \rightarrow 0$ when the stress is close to 0 and to $P_R \rightarrow (e^{V/V_0} - 1)/(e^{V/V_0})$ when $\sigma_{pl} \rightarrow \sigma_u$. For sufficiently large values of V/V_0 , P_R tends toward 1.

4.1. Adjustment of the model parameters

Among the four model parameters, σ_u , σ_0 , m and V_0 , the m value is given by Lee, i.e. $m = 1.192$. It is assumed that this value represents also the CSD for the 22NiMoCr3-7 steel. The reference volume, V_0 is chosen following Beremin's work [3], i.e. as a cubic volume containing about 8 prior austenite grains: $50 \times 50 \times 50 \mu\text{m}^3$. Parameters σ_u and σ_0 were fitted to data obtained from PVCN tests on SA 508 steel. Actually only the σ_u parameter has to be fitted on experimental data because it can easily be shown that $\sigma_u/\sigma_0 = (d_0/d_u)^{1/2}$. In SA 508 steel, $\sigma_u/\sigma_0 = 3.328$ was obtained from Lee. In order to investigate the predictive capability of the model the parameter σ_u was determined using SA 508 fracture toughness measured at $-100 \text{ }^\circ\text{C}$ such that a failure probability close to 50% (45%) was obtained for $K_{Ic} = 82.9 \text{ MPa } \sqrt{\text{m}}$.

5. Results and discussion

Fig. 5a shows the evolution of the P_R as a function of the K_{Ic} obtained from the simulations of PCVN tests for SA 508 steel at the test temperatures. In this figure the experimental K_{Ic} values are represented by a full circle. Using the K_{Ic} value at $-100 \text{ }^\circ\text{C}$ to fit σ_u (Fig. 5a) leads to $\sigma_u = 14,000 \text{ MPa}$ and $\sigma_0 = 4300 \text{ MPa}$. In Fig. 5a, it is shown that fitting the σ_u parameter at $-100 \text{ }^\circ\text{C}$ tends to high P_R values for the experimental data obtained at lower temperatures. It is clear that testing the applicability of the present model to the results published by Lee [1] would require a set of experimental results much larger than that reported in their publication.

The statistical model was then applied to predict the experimental toughness scattering obtained on 22NiMoCr3-7 steel for which a wider data base was available. The 3D numerical simulations of CT(1T) tests were post-processed in order to evaluate the failure probabilities. For each test temperature, the K_{Ic} values corresponding to $P_R = 10\%$, 50% and 90% are shown in Fig. 5b. Using $\sigma_u = 14,000 \text{ MPa}$ leads to a good prediction

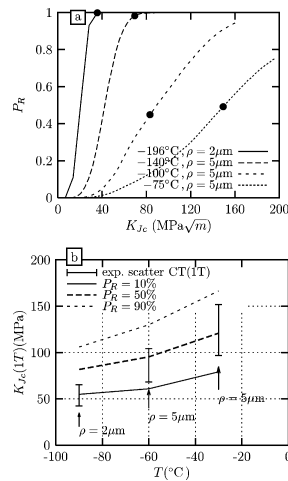


Fig. 5. Evolution of the failure probabilities obtained with the statistical model. (a) $\sigma_u = 14,000$ MPa fitted on SA 508 results at -100°C on PCVN geometry ($\sigma_0 = 4200$ MPa, $n = 1.192$, $V_0 = 0.000125$ mm³). (b) Prediction of the fracture toughness scattering on 22NiMoCr3-7 steel with CT(1T) geometry. ρ is the initial mesh crack tip radius.

of the experimental scattering at all test temperatures investigated (Fig. 5b).

6. Summary—Conclusions

(1) Anomalously large values for the cleavage stress reported by Lee et al. [1] are likely due to

two effects in their analysis: (i) the use of a constitutive law for SA 508 steel in Mc Meeking numerical calculations which largely overestimates the stress–strain curves for this material; (ii) the use of plane strain SSY assumption which does not apply when the fracture toughness (i.e. test temperature) is too high.

(2) Lee's results concerning carbide size distribution are used in a new statistical model based on the weakest link concept to predict the variation of fracture toughness with temperature in SA 508 steel.

(3) This model is also applied to another steel (22NiMoCr3-7) for which a larger data base was available, using the CSD measured by Lee. A good agreement between experimental and predicted scattering for the fracture toughness is obtained provided that the parameters appearing in this model are correctly fitted.

References

- [1] Lee S, Kim S, Hwang B, Lee B, Lee C. Acta Mater 2002;50:4755–62.
- [2] Curry D, Knott J. Met Sci 1979;341–5.
- [3] Beremin F. Met Trans 1983;14A:2277–87.
- [4] Wallin K, Saario T, Törrönen K. Met Sci 1984;18:13–6.
- [5] McMeeking R. J Mech Phys Solids 1977;25:357–81.
- [6] Tanguy B, Besson J, Piques R, Pineau A. In: Neimitz A, Rokach I, Kocañda D, Gološ K, editors. ECF 14, Fracture Mechanics Beyond 2000, vol. 3. Sheffield: EMAS Publishing; 2002.
- [7] Joyce J, Tregoning R. Eng Fract Mech 2001;68:861–94.
- [8] Besson J, Foerch R. Comp Meth Appl Mech Eng 1997;142:165–87.
- [9] Mudry F. Nucl Eng Des 1987;105:65–76.

Cleavage fracture of RPV steel following warm pre-stressing: micromechanical analysis and interpretation through a new model

S. R. BORDET¹, B. TANGUY¹, J. BESSON¹, S. BUGAT², D. MOINEREAU² and A. PINEAU¹

¹Centre des Matériaux, Ecole des Mines de Paris, UMR CNRS 7633, BP 87, 91003 Evry Cedex, France, ²EDF R&D, Département MMC, Les Renardières, 77818 Moret-sur-Loing Cedex, France

Received in final form 17 March 2006

ABSTRACT In this paper, the warm pre-stress (WPS) effect on the cleavage fracture of an 18MND5 (A533B) RPV steel is investigated. This effect, which describes the effective enhancement of the cleavage fracture toughness at low temperature following a prior loading at high temperature, has received great interest in light of its significance in the integrity assessment of structures, such as nuclear pressure vessels, subjected to thermal transients. Several loading cycles between room temperature (RT) and $-150\text{ }^{\circ}\text{C}$ are considered: Load-Unload-Cool-Fracture (LUCF), Load-Cool-Fracture (LCF) and Load-Cool with Increasing K-Fracture (LCIKF). All experiments complied with the conservative principle, which states that no fracture will occur if the applied stress intensity factor (SIF) decreases (or is held constant) while the temperature at the crack-tip decreases, even if the fracture toughness of the virgin material is exceeded. The experimental results indicate that an effective WPS effect is present even at small pre-load ($K_{\text{wps}} = 40\text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$), and that a minimum critical slope ($-\Delta K/\Delta T$) in the LCIKF cycle has to be exceeded to induce cleavage fracture between RT and $-150\text{ }^{\circ}\text{C}$. Numerical modelling was performed using mixed isotropic and kinematic hardening laws identified on notched tensile (NT) specimens, tested in tension to large strains (up to 40%), followed by large compressive strains. Detailed microstructural investigations on compact tensile (CT) and NT fracture test specimens were performed so as to determine the nature of the cleavage initiation sites, as well as the local mechanical conditions at fracture. Based on this local information, a new cleavage model was calibrated and applied to predict the probability of cleavage fracture after WPS: it is shown that the predictions are in good agreement with the experimental results.

Keywords Beremin model; cleavage fracture; local approach; RPV steel; structural integrity; WPS.

NOMENCLATURE

a_0 = crack length in CT toughness specimen (mm)
 d = distance (mm)
 ΔK = SIF increment between RT and $-150\text{ }^{\circ}\text{C}$ ($\text{MPa}\sqrt{\text{m}}$)
 $(-\Delta K/\Delta T)$ = transient slope of the LICKF cycle between RT and $-150\text{ }^{\circ}\text{C}$ ($\text{MPa}\sqrt{\text{m}}\cdot^{\circ}\text{C}^{-1}$)
 K, K_{el} = stress intensity factor ($\text{MPa}\sqrt{\text{m}}$)
 K_{frac} = stress intensity factor at fracture ($\text{MPa}\sqrt{\text{m}}$)
 $K_{\text{Ic}}, K_{\text{Jc}}$ = mode I fracture toughness for the virgin material ($\text{MPa}\sqrt{\text{m}}$)
 K_{wps} = stress intensity factor after warm pre-stressing ($\text{MPa}\sqrt{\text{m}}$)

Correspondence: E-mail: S.R.Bordet.98@cantab.net, benoit.tanguy@ensmp.fr, stephane.bugat@edf.fr, dominique.moinereau@edf.fr, andre.pineau@ensmp.fr

- m = Weibull modulus
 N, N_0 = remaining and initial number of nucleation sites
 P_f = experimental or predicted probability of failure
 $P_{\text{nuc}}, P_{\text{propag}}$ = local probability of microcrack nucleation and propagation
 P_{cleav} = local probability of cleavage fracture
 R, R_0, Q, C, D = coefficients of the material's hardening law
 t = loading 'time'
 T, T_{frac} = test temperature and temperature at fracture ($^{\circ}\text{C}$)
 V_p = crack tip plastic zone (mm^3)
 V_0 = reference volume (mm^3)
 W = ligament in CT toughness specimen (mm)
 X = kinematic stress tensor
 δ_{el} = crack tip opening displacement (mm)
 ϵ_p, p = accumulated equivalent plastic strain
 $\epsilon_{p,0}$ = reference accumulated plastic strain
 ϵ^p = axial plastic strain
 $\bar{\epsilon}$ = mean axial strain in the minimum section of the NT specimen
 ϕ, ϕ_0 = actual and initial diameter of the NT specimen's minimum section (mm)
 σ_1 = maximum principal stress (MPa)
 σ_{th} = minimum cleavage stress (MPa)
 σ_u, σ_u^* = reference Weibull stress corresponding to a 63.2% failure probability (MPa)
 σ_w, σ_w^* = Beremin's and modified Weibull stress (MPa)
 σ_{ys} = yield stress at test temperature and strain rate (MPa)
 $\sigma_{\text{ys},0}$ = reference yield stress (MPa)

INTRODUCTION

Since the first investigations four decades ago, a large number of experiments on ferritic steels has confirmed the existence of a warm pre-stress (WPS) effect, which describes the effective enhancement of the cleavage fracture toughness at low temperature following the application, at a higher temperature, of a stress intensity factor (SIF) which exceeds the fracture toughness of the virgin material at low temperature (see e.g. the extensive reviews by Yukawa¹, Nichols², Pickles and Cowan³ and Smith and Garwood⁴). These experiments allowed for the establishment of the so-called 'conservative principle', which states that no fracture will occur if the applied SIF decreases (or is held constant) while the temperature at the crack-tip decreases, even if the fracture toughness of the virgin material is exceeded. In structural integrity assessments involving a prior overload or a thermal transient, such as that of a nuclear pressure vessel subjected to a pressurized thermal shock (PTS) consecutive to a loss of coolant accident (LOCA), such a principle is of great importance in the evaluation of the safety margins.

Three principal reasons have been advanced to explain the WPS effect: the blunting of the crack tip at high temperature, the formation of high compressive stresses on elastic unloading and a change in the cleavage frac-

ture micromechanisms induced by plastic deformation.⁵ While all these factors certainly contribute to the effective toughness enhancement following WPS, their relative incidence on the fracture risk is not yet fully established.⁵⁻¹⁵ Several models have been proposed to predict the WPS effect on toughness and can broadly be divided into three categories. The first category includes Chell's type models based on the superposition of crack tip solutions corresponding to the different loading steps of the WPS cycle.¹⁶⁻¹⁸ These models mainly diverge in their choice of fracture criterion. While Chell *et al.*¹⁶ defined fracture by the attainment of a critical value of an elastic \mathcal{J} -integral calculated from the superposition of displacement solutions at the crack tip, both Curry¹⁷ and Smith and Garwood¹⁸ used superposition of crack tip stress solutions, in conjunction with the Ritchie-Knott-Rice (RKR) fracture model¹⁹ for Curry, and a reference stress approach for Smith and Garwood. The second category centres around the Master Curve method, which has recently been extended by Wallin to include an engineering WPS correction, based on the analysis of a large experimental data set.²⁰ The third category regroups local approach type models: following early work by Curry¹⁷ and Beremin,⁵ the Beremin model^{8,15,21} and modified versions^{9,10,12} of it have been extensively applied over the last 20 years to address the complex nature of the WPS effect at the microstructural level.

Table 1 18 MND 5 chemical composition (in weight %)

| C | Mn | Si | Ni | Cr | Mo | Cu | S | P | Al | V | Ti |
|------|------|------|------|------|-------|-------|--------|-------|-------|-------|-------|
| 0.19 | 1.50 | 0.23 | 0.66 | 0.17 | 0.485 | 0.084 | <0.001 | 0.004 | 0.011 | 0.004 | 0.006 |

Table 2 Mechanical characteristics at RT

| Orientation | E (MPa) | $R_{p0.2\%}$ (MPa) | R_m (MPa) | $A\%$ |
|-------------|-----------|--------------------|-------------|-------|
| L | 205 300 | 517 | 650 | 25 |

This study is a continuation of Lefevre *et al.*'s work on the WPS effect in 18MND5 RPV steel.^{12,22,23} Its objective is threefold: verifying the existence of a WPS effect for small WPS levels ($K_{wps} = 40 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$), assessing the 'conservative principle' through different WPS cycles on compact tensile (CT) specimens and applying a new cleavage model for predicting cleavage toughness following WPS. Lefevre *et al.*¹² showed a strong effect of the material hardening law (i.e., purely isotropic or kinematic) on the fracture probability predictions, a result consistent with other published results.^{9,14} Consequently, strong emphasis was placed on the precise characterization of the material's hardening law, as well as the conditions of cleavage initiation by electron microscopy.

The paper is organized as follows. The first sections are devoted to the presentation of 18MND5 RPV steel and of the experimental test results. The next sections present the modelling of the tensile and toughness tests, the main features of a recently proposed cleavage model and the procedure that was employed for calibrating the model parameters. The last sections present and discuss the model predictions of the experimental fracture toughness scatter following the different WPS cycles.

MATERIAL CHARACTERISTICS

The studied material is a 200 mm thick rolled plate of tempered bainitic 18MND5 RPV steel. It was produced by Creusot Loire Industrie in 1995 to meet the requirements of the French RCC-M standard.²⁴ Table 1 gives its chemical composition.¹² The conventional mechanical properties in the rolling (L) direction at room temperature (RT) are listed in Table 2.

Optical (Fig. 1a) and scanning electron (Fig. 1b) micrographs reveal a tempered bainitic microstructure. Most carbides in 18MND5 are elongated and tend to break normal to their long axis under tensile straining²⁶ (especially carbides whose long axis is orientated in the loading direction): the carbide characteristic length with regard to microcrack formation is therefore the carbide width, whose

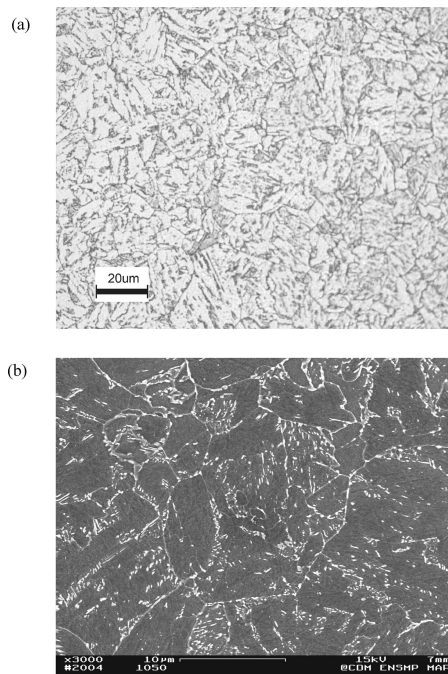


Fig. 1 Optical (a) and SEM (b) micrographs of 18MND5 RPV steel showing a tempered bainitic microstructure.

maximum size was measured as being close to $0.7 \mu\text{m}$ (the last figure indicates that a significant fraction of the carbides exceed a micron in length). The main types of inclusions, determined by X-ray microanalysis, are the following: manganese sulfides (MnS), titanium nitrides (TiN), oxides of Al, Mg, Si and Ca. All these inclusions tend to be clustered and are often bound together.

MECHANICAL TESTS

Extensive testing has already been performed on 18MND5 steel in previous projects^{22,23} and part of it has been published in Lefevre *et al.*¹² All isothermal toughness results on the lower shelf produced in these projects are plotted in Fig. 2, and their scatter represented in Fig. 3.

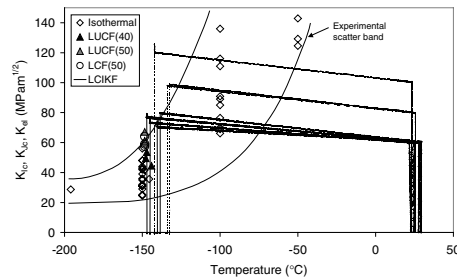


Fig. 2 Experimental LUCF, LCF and LCIKF cycles on CT-25 specimen, together with isothermal toughness test results on the lower shelf and transition region. In the legend, numbers in brackets designate the value of $K_{Ic,0}$ in $\text{MPa}\sqrt{\text{m}}$.

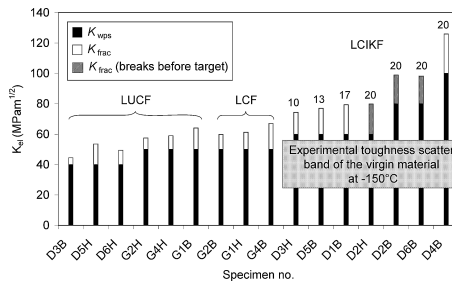


Fig. 3 Toughness enhancement following WPS as measured by the elastic K_{Ic} at fracture. The numbers above the LCIKF bars represent the targeted SIF increment ΔK in $\text{MPa}\sqrt{\text{m}}$ between RT and -150°C .

This study particularly sought to better characterize the material stress–strain behaviour in the large deformation range, as well as generating toughness data following different WPS cycles between RT and -150°C , most of them characterized by relatively small applied $K_{Ic,0}$ values at RT (40 to $60 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$). Three different test geometries were used:

- conventional smooth tensile specimens with a diameter of 5 mm,
- notched tensile (NT) specimens with a notch radius of 2.4 mm, a minimum section of 6 mm, and a maximum section diameter of 10.8 mm,
- CT toughness test specimen, with a thickness of 25 mm and an effective crack length to width ratio, a_0/W , of 0.5. Fatigue pre-cracking and testing were conducted according to ASTM standard E1820-01.²⁵

All tests were performed with an Instron servo-hydraulic machine. A mean strain rate of 0.0005 s^{-1} was used for

all smooth and NT tests, while the isothermal fracture toughness tests on CT specimens were conducted at a crosshead speed of 0.2 mm min^{-1} . For low temperature testing at or above -150°C , an environmental test chamber, cooled down by vaporization of liquid nitrogen, was used. A ventilating fan ensured that the temperature was homogeneous within the chamber. For both tensile and toughness tests, the temperature was recorded by means of two thermocouples spot-welded on the specimen surface. Note that the temperature regulation of the chamber prevents cooling down the air within it below -150°C , which means that the temperature of the test specimens was always slightly above -150°C .

Tensile stress–strain behaviour

The WPS stage of the Load-Unload-Cool-Fracture (LUCF) cycle involves large plastic straining of fatigue pre-cracked CT specimens in tension followed by large plastic straining in compression at the crack tip. The correct quantification of the kinematic and isotropic contributions to material hardening is therefore essential for a correct representation of the strain and stress fields during the reloading phase at low temperature. As mentioned in the introduction, Lefevre *et al.*¹² showed that the choice of the material hardening law as purely isotropic or kinematic has significant incidences on the toughness predictions following WPS: while both produced similar results for WPS cycles with mild or no elastic unloading, in the case of the LUCF cycle, the isotropic hardening law produced far more conservative predictions than the kinematic one. Kinematic and isotropic behaviour of 18MND5 steel in the large deformation range was characterized by tension–compression tests on NT specimens at RT. The NT geometry allowed very large strains to be generated within the notched region without buckling. The specimens were first strained to different values of mean strain (10, 20, 30 and 40%), calculated as $\bar{\epsilon} = 2 \times \ln(\phi/\phi_0)$ where ϕ and ϕ_0 are the actual and initial minimum section diameters, respectively. Once the specimen had reached the specified value for ϕ in tension, the specimen was compressed back so that ϕ returned to its initial value. Two additional NT tests were conducted in tension only at -100 and -150°C , so as to model the effect of temperature on the hardening law.

Three tensile tests on the smooth specimens were also done at 20, -100 and -150°C , so as to obtain conventional stress–strain curves to compare with the hardening laws identified from the NT tests.

NT fracture tests

Four NT specimens (same geometry as previously used) were first broken at -150°C , which is the temperature at

Table 3 Experimental data on the notched tensile (NT) specimens tested at $-188\text{ }^{\circ}\text{C}$

| No. | $T\text{ (}^{\circ}\text{C)}$ | $\bar{\epsilon}$ (%) | $\bar{\sigma}$ (MPa) | Distance from notch tip (mm) | Initial distance from notch tip (mm) | Nature of initiation site | Tensile plastic strain ϵ_{p22} (%) | Tensile stress σ_{22} (MPa) | Peak stress distance from notch tip (mm) | Tensile peak stress $\sigma_{22,peak}$ (MPa) |
|-------|-------------------------------|-------------------------|-------------------------|---------------------------------------|---|---------------------------------|---|--|---|---|
| AE7B | -188 | 2.18 | 1373 | 2.20 | same | TiN | 1.11 | 1663 | 3.0 | 1698 |
| AE7H | -188 | 1.91 | 1356 | 2.28 | same | TiN | 0.82 | 1637 | 3.0 | 1652 |
| AE8B | -188 | 2.21 | 1367 | 2.61 | same | TiN | 0.96 | 1693 | 3.0 | 1701 |
| AE8H | -188 | 3.26 | 1374 | 2.60 | same | - | 1.97 | 1798 | 3.0 | 1818 |
| AE9B | -188 | 2.96 | 1381 | 2.37 | same | TiN | 1.70 | 1746 | 3.0 | 1786 |
| AE9H | -188 | 3.03 | 1371 | 2.08 | same | TiN | 1.99 | 1709 | 3.0 | 1798 |
| AE10B | -188 | 2.42 | 1371 | 2.24 | same | TiN | 1.29 | 1689 | 3.0 | 1730 |
| AE10H | -188 | 1.37 | 1332 | 1.86 | same | TiN | 0.58 | 1537 | 2.25 | 1547 |
| AE11B | -188 | 1.78 | 1358 | 2.62 | same | TiN | 0.61 | 1627 | 3.0 | 1628 |
| AE11H | -188 | 1.81 | 1351 | 1.71 | same | TiN | 1.09 | 1565 | 3.0 | 1635 |

which the pre-stressed CT specimens are reloaded in the WPS experiments.²⁶ All specimens failed at a mean strain in excess of 40%. Fractographic observations revealed that cleavage initiated at ductile holes developed around broken or detached TiN and MnS inclusions. As it is shown below, this mechanism is not representative of the cleavage initiation mechanism operating in the CT geometry at $-150\text{ }^{\circ}\text{C}$. In order to obtain cleavage nucleation conditions approaching those of the CT geometry at $-150\text{ }^{\circ}\text{C}$, the rest of the NT specimens (i.e., 10 samples) were tested in liquid nitrogen. The temperature, measured on the specimen surface, consistently stabilized around $-188\text{ }^{\circ}\text{C}$. All specimens failed by cleavage at very low strains (the maximum recorded mean strain was 3.26%). The results are summarized in Table 3.

WPS experiments on CT-25 geometry

Figures 2 and 3 present the whole set of WPS experiments that were performed as part of this study, together with the toughness results already available on the lower shelf.¹² It is important to note that all values of K presented here, at WPS, loading and fracture levels, are elastic values, thereafter noted K_{el} , calculated according to

$$K_{el} = \frac{P}{BW^{3/2}} f(a_0/W),$$

where P is the applied load, B is the thickness, W is the specimen width, a_0 is the crack size and f is a geometrical factor given by ASTM E1820-01. Three different WPS cycles were conducted: LUCF, LCF (Load-Cool-Fracture) and LCIF (Load-Cool-Increasing K-Fracture). All corresponding toughness results, as well as two new toughness values of the virgin material at $-150\text{ }^{\circ}\text{C}$, are reported in Table 4.

The LUCF cycles consisted of loading the specimen to $K_{wps} = 40$ or $50\text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ at RT, unloading, cooling under load control to $-150\text{ }^{\circ}\text{C}$ and then reloading to fracture. Three toughness specimens were tested in each case. For $K_{wps} = 40\text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$, all toughness values are in excess of K_{wps} , which conforms to the WPS principle. Although the toughness values still lie within the toughness scatter band of the virgin material at $-150\text{ }^{\circ}\text{C}$, as shown in Fig. 2, which is expected for such a small K_{wps} , all three values are higher than the 63.2% fracture probability toughness K_0 of the virgin material (equal to $40.6\text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$), which suggests that there is indeed a small but effective WPS effect. This is supported by the three LUCF tests with $K_{wps} = 50\text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$: in this case, all toughness values exceed not only K_{wps} , but also all the available toughness values for the virgin material at $-150\text{ }^{\circ}\text{C}$.

The three LCF cycles, which consisted of pre-loading the specimen at RT to $K_{wps} = 50\text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$, cooling it down to $-150\text{ }^{\circ}\text{C}$ under constant applied SIF (i.e., $K_{applied} = K_{wps}$), and then reloading at $-150\text{ }^{\circ}\text{C}$, again confirm the WPS effect. All specimens survived the transient and failed during the reloading stage. As expected, for a same K_{wps} of $50\text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$, the shift in toughness at $-150\text{ }^{\circ}\text{C}$ following the LCF cycle is on average greater than for the LUCF cycle, even if the scatter of the toughness results means that one of the LUCF toughness values was higher than two of the values obtained after the LCF cycle.

The LCIF tests were conducted as follows. The CT-25 specimen was first loaded to a pre-stress value of 60, 80 or $100\text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ at RT. The specimen was then cooled down by means of the environmental test chamber. Its temperature, measured by the thermocouples, was continuously recorded by a computer, which, after calculating the load to apply so as to describe the specified transient ($-\Delta K/\Delta T$) between RT and $-150\text{ }^{\circ}\text{C}$, controlled the test machine. If the specimen survived the transient,

Table 4 Experimental data on the CT toughness specimens for the various WPS cycles. Data related to TiN-induced cleavage are in bold characters, while those related to carbide-induced cleavage are in italic

| No. | Cycle type | T_{frac} (°C) | $K_{\text{el,wps}}$ (MPa√m) | Targeted | | Breaks before target | Cleavage initiation sites | | | | Normal plastic strain ϵ_{p22} (%) | $\epsilon_{p,\text{cum}}$ (%) | Normal stress σ_{22} (MPa) | Peak stress distance from crack tip (mm) | Normal peak stress $\sigma_{22,\text{peak}}$ (MPa) |
|------------|---------------|------------------------|-----------------------------|-------------------------|------------------------------|----------------------|---------------------------|------------------------------|--------------------------------------|---------------------------|--|-------------------------------|-----------------------------------|--|--|
| | | | | K_{el} (MPa√m) | $K_{\text{el,frac}}$ (MPa√m) | | Distance from side (mm) | Distance from crack tip (mm) | Initial distance from crack tip (mm) | Nature of initiation site | | | | | |
| D1H | Isoth. | -145.6 | - | - | 35.7 | - | 4.7 | 0.034 | 0.036 | TiN | 0.157 | 0.162 | 1927 | 0.009 | 2294 |
| D4H | Isoth. | -148.6 | - | - | 41.6 | - | 9.6 | 0.078 | 0.08 | TiN | 0.074 | 0.079 | 1791 | 0.013 | 2311 |
| D3B | LUCF | -144.1 | 40 | - | 44.5 | - | 6.1 | 0.037 | 0.041 | TiN | 0.193 | 0.375 | 2007 | 0.015 | 2448 |
| <i>D6H</i> | <i>LUCF</i> | <i>-147.2</i> | <i>40</i> | - | <i>49.5</i> | - | <i>2.5</i> | <i>0.01</i> | <i>0.014</i> | <i>Carbide</i> | <i>5.0</i> | <i>6.4</i> | <i>2332</i> | <i>0.035</i> | <i>2376</i> |
| D5H | LUCF | -147.8 | 40 | - | 53.6 | - | 4.2 | 0.043 | 0.048 | TiN | 0.258 | 0.394 | 2122 | 0.020 | 2441 |
| G2H | LUCF | -148.5 | 50 | - | 57.5 | - | 11.1 | 0.036 | - | Sub-surf. | - | - | - | - | - |
| G4H | LUCF | -148.4 | 50 | - | 59 | - | 3.6 | 0 | 0 | Micro-duct. | - | - | - | 0.020 | 2360 |
| G1B | LUCF | -148.5 | 50 | - | 64.1 | - | 6.3 | 0.128 | - | Sub-surf. | - | - | - | - | - |
| G2B | LCF | -148.6 | 50 | - | 59.9 | - | 4.3 | 0.065 | - | Sub-surf. | - | - | - | - | - |
| G1H | LCF | -148.5 | 50 | - | 61.2 | - | 8.5 | 0.085 | 0.091 | TiN | 0.138 | 0.145 | 1945 | 0.020 | 2357 |
| G4B | LCF | -148.5 | 50 | - | 67.1 | - | 2.7 | 0.12 | 0.127 | TiN | 0.141 | 0.148 | 1947 | 0.025 | 2377 |
| D3H | LCIKF | -140.4 | 60 | 70 | 74.4 | N | 6.3 | 0.217 | 0.226 | TiN | 0.094 | 0.100 | 1768 | 0.029 | 2373 |
| <i>D5B</i> | <i>LCIKF</i> | <i>-144.9</i> | <i>60</i> | <i>73</i> | <i>77.1</i> | <i>N</i> | <i>6.7</i> | <i>0.028</i> | <i>0.037</i> | <i>Carbide</i> | <i>1.7</i> | <i>1.8</i> | <i>2353</i> | <i>0.014</i> | <i>2461</i> |
| D1B | LCIKF | -147.1 | 60 | 77 | 79.4 | N | 3.8 | 0.052 | - | Sub-surf. | - | - | - | - | - |
| D2H | LCIKF | -138.5 | 60 | 80 | 79.9 | Y | 8.3 | 0.151 | 0.161 | TiN | 0.146 | 0.153 | 1892 | 0.034 | 2375 |
| D6B | LCIKF | -134 | 80 | 100 | 98.3 | Y | 4.9 | 0.15 | 0.167 | TiN | 0.207 | 0.214 | 1953 | 0.052 | 2291 |
| D2B | LCIKF | -132.3 | 80 | 100 | 99 | Y | 5.2 | 0.318 | - | Sub-surf. | - | - | - | - | - |
| D4B | LCIKF | -142.3 | 100 | 120 | 126 | N | 10.9 | 0.419 | 0.447 | TiN | 0.147 | 0.154 | 1949 | 0.086 | 2403 |

the specimen was reloaded as for an isothermal test. Because the imposed variation of load with temperature was small, slight variations of the load, due to noise in the electrical signals and in the response of the hydraulic system of the test machine, meant that the machine reloaded at temperatures between -140.4 and -147.1°C . Nevertheless, it is important to note that, for these specimens, K_{frac} exceeded in all cases the targeted (end of transient) K_{el} at -150°C (equal to $K_{\text{wps}} + \Delta K$), so that it can be considered that the latter value would nevertheless have been reached, if these perturbations had not been present.

Several interesting observations can be made from the LCIKF test results listed in Table 4:

- All specimens, whether they broke during the transient or during reloading at -150°C , passed through the experimental toughness scatter band of the virgin material.
- The specimens with a $K_{\text{wps}} = 60 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ and a SIF increment ΔK of 10, 13 and $17 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ survived the transient, whereas the specimen with a ΔK of $20 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ failed. None of these specimens had a final K_{frac} exceeding K_{wps} by more than $20 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$.
- Both specimens with a $K_{\text{wps}} = 80 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ and a ΔK of $20 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ failed before meeting the target temperature. This means that the condition ' $\Delta K = 20 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ given $K_{\text{wps}} = 80 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ ' still corresponds to a high fracture probability level.
- Increasing the K_{wps} to $100 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ allows going beyond the $\Delta K = 20 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ target, which suggests that the higher the K_{wps} , the higher is the enhancement in toughness (although an optimum K_{wps} -value may exist beyond which this enhancement starts decreasing: see discussion in the section devoted to the toughness predictions).

MICROSTRUCTURAL AND MICROMECHANICAL INVESTIGATIONS

Fractographic study of the cleavage nucleation sites

Fracture surfaces of all NT and CT specimens have been examined on a scanning electron microscope (SEM): the site of cleavage initiation was identified by following tear ridges and river lines, the nature of the particle responsible for initiation identified by X-ray microanalysis (when the size of the particle allowed it), and its distance from the crack or notch tip measured. Note that all distances given hereafter, whether physically measured or inferred through finite element (FE) simulation (see next section), refer to the deformed configuration at fracture.

Out of the 10 NT specimens of virgin material that were tested in liquid nitrogen, nine failed at a TiN inclusion, whether bound to another particle (e.g. MnS) or not (Table 3). The origin of cleavage in one of the specimens

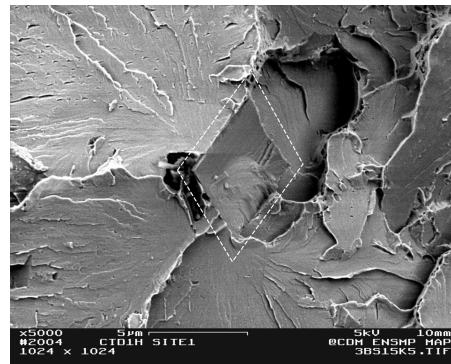


Fig. 4 Initiation site of pre-stressed specimen D3B (subjected to an LUCF cycle with $K_{\text{wps}} = 40 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$). Cleavage initiated at the square shaped TiN particle (about 4 by $4 \mu\text{m}$ wide) circumscribed by the white dotted box. Note the presence of a dark particle bound to the TiN particle.

could not be categorically determined: cleavage apparently originated along an entire grain boundary, which suggests a re-initiation on a new cleavage plane rather than a fresh start. The true origin of cleavage may therefore lie below the surface. The fact that 90% of the specimens failed at a TiN particle clearly demonstrates that TiN particles, when not prematurely broken (see discussion below), constitute preferential sites for cleavage nucleation in the virgin material.

The same conclusion is reached for cleavage initiation in the CT geometry, although other competitive mechanisms were observed. Cleavage predominantly initiated at TiN particles (Fig. 4), alone or bound to other particles, except in two specimens, where the initiating particle was a grain boundary carbide, and a third one where cleavage started at a zone of micro-ductile damage (holes) right at the crack tip. For the latter mechanism, it is possible that the cracking of a carbide was ultimately responsible for cleavage initiation, but this could not be ascertained. In five specimens, the initiation site was located below the surface: this is testified by the river lines converging to a secondary crack emerging onto the observable fracture surface and/or secondary cracks that are found on both conjugate fracture surfaces. In such cases, the recorded distances correspond to the region of re-initiation on the final fracture surface. These distances can therefore significantly differ from the distance to the actual initiation site. To sum up, in terms of frequency, 55% of the CT specimens initiated cleavage at TiN particles, 11% at carbides, 6% at a zone of micro-ductility and 28% at undetermined sites.

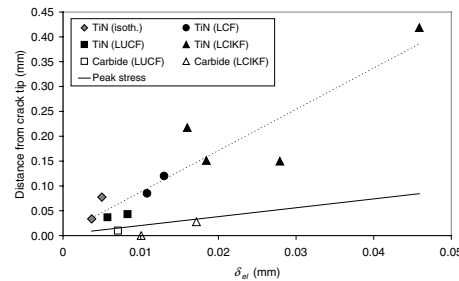


Fig. 5 Distance of the cleavage initiation sites and of the peak stress location from the crack tip as a function of the elastic CTOD δ_{el} .

Figure 5 is a plot of the distance of the cleavage initiation sites from the crack tip as a function of the crack tip opening displacement (CTOD), δ_{el} , at fracture, calculated as

$$\delta_{el} = K_{cl}^2 / 2\sigma_{ys}E(1 - \nu^2). \quad (1)$$

Also represented in Fig. 5 is the distance of the peak stress location to the crack tip at fracture. Several remarks can be made:

- The distance between the peak stress location and the crack tip varies linearly with the CTOD, namely: $d_{\text{peak stress-crack tip}} \approx 1.78 \times \delta_{el}$, for the deformed configuration. This relationship is valid for all cycles and WPS levels investigated here.
- All identified TiN particles that initiated catastrophic cleavage are located beyond the peak stress location with regard to the crack tip. In other words, they are located in a region that has not experienced the peak stress, characterized by a stress slightly lower than the peak stress and by low plastic strains²⁷ (see Table 4). Despite the expected scatter, there is, as for the peak stress, an overall proportional relationship between the TiN initiation site location and the CTOD at fracture: $d_{\text{initiation site-crack tip}} \approx 8.33 \times \delta_{el}$. This linear relationship testifies to the determinant role of high tensile stresses in propagating cleavage.²⁷
- The fact that the initiation points lie at a distance more than four times greater than that between the peak stress location and the crack tip indicates that the TiN population is scarce in the material. It is possible that the WPS cycle causes an additional shift of the initiation point distances to the crack tip compared with the isothermal tests (for example through the breaking of potentially critical TiN particles during the WPS cycle, as corroborated by the presence of an arrested microcrack nucleated at a TiN particle ahead of the crack-tip in one of the LCIKF specimens). Only two initiation distances for the virgin material

are available here: additional measurements at -150°C (especially measurements corresponding to both ends of the toughness scatter range) would be needed to better quantify the WPS contribution to the initiation point distance.

- The two sites that initiated cleavage by carbide cracking are located in the immediate vicinity of the peak stress. This contrasts with the sites that initiated cleavage by TiN cracking, which are found much further away.

For both the carbides and the TiN particles, the peak stress location constitutes the most critical site for cleavage propagation, as cleavage is stress controlled.^{5,19,28} The main difference is that the carbide population is very large compared with the TiN population, which makes it much more likely to have a critical carbide at the peak stress location. Furthermore, a high local stress is required to propagate a microcrack nucleated at a carbide, because of its small size, so that the critical region for this mechanism will necessarily remain focused around the peak stress location. The much larger size of the TiN particles (typically 5 to 10 times greater than a carbide), which offers both a larger microcrack nucleus and a greater release of strain energy on cracking to assist early propagation, means that a local stress lower than the peak stress is sufficient to trigger cleavage. Furthermore, in small-scale yielding (SSY), the region within a contour of constant stress becomes increasingly wider as the stress diminishes: the small number of TiN particles is therefore compensated by a larger critical volume for cleavage initiated by TiN particles, compared with that associated with carbides. The frequencies given above indicate that the combination of particle size and volume concentration, with regard to the crack tip mechanical environment at -150°C following the different WPS cycles, is more critical for the TiN particles than for the carbides.

The last observation partly explains why no cleavage initiation by carbide cracking was observed in the NT geometry. Not only is the stress intensification much lower, but the plastic zone is also much wider in the NT geometry than in the CT geometry. This accentuates the bias towards cleavage initiation by TiN cracking, as indeed observed. The situation is different in the CT geometry because the strong and very localized stress intensification at the crack tip allows for the carbide and TiN particles to compete as cleavage initiators. One must, however, keep in mind that the loading path, more specifically the relative evolution of the local stress and strain, can completely alter the present trends. In the NT geometry at -150°C , for example, cleavage was initiated at ductile holes after very large straining ($>40\%$). Fractographic observations revealed the presence of several arrested microcracks nucleated at cracked TiN particles (not observed in the NT tests at -188°C), that subsequently grew by ductile growth (Fig. 6). This

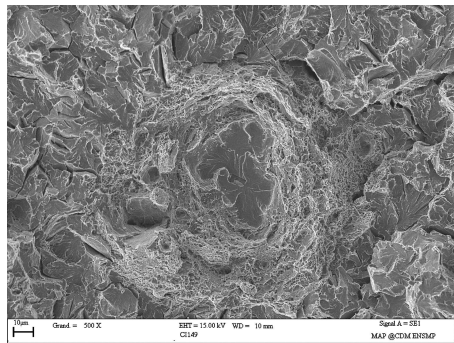


Fig. 6 Microcrack arrested at a grain boundary, followed by extensive ductile growth, in specimen AE15M tested at $-150\text{ }^{\circ}\text{C}$. The microcrack was nucleated from the cracking of a rectangular TiN particle, clearly visible in the centre of the micrograph.

indicates that microcracks were indeed formed at cracked TiN particles, but the local stress was then insufficient to propagate the microcracks, hence the occurrence of an alternative initiation mechanism for macroscopic cleavage, after the local stress level has been sufficiently raised through work hardening.

Local fracture stress and strain estimations

Based on the location of the initiation site in the deformed NT and CT geometries, the local stress and strain at fracture were evaluated from FE calculations (presented in the next part). For simplification, it was assumed that, for both NT and CT geometries, the initiation points lay on the mid-plane. Stereoscopic measurements on toughness specimens by Bruckner-Foit *et al.*,²⁹ as well as the recent study of Shabrov *et al.*³⁰ on TiN cracking in NT specimens, suggest that the mid-plane statistically represents the most likely surface of cleavage, although actual results are scattered around it. An axisymmetric FE model was used to compute the local stress and strain at fracture in the NT geometry, while plane strain modelling was used for the CT specimen. For the latter geometry, under SSY, plane strain conditions dominate at the crack tip over approximately 80% of the mid-thickness, that is up to 2.5 mm from the specimen free surface: this region encompasses all initiation points of this study (3D FE modelling, not presented here, confirmed that, for the small applied loads of this study, the plane strain assumption was indeed valid for all initiation points).

Table 3 presents the estimations of the local fracture stress and strain values for the NT tests at $-188\text{ }^{\circ}\text{C}$ of the virgin material. Recalling that in all NT test spec-

imens, except possibly in one specimen, cleavage initiated at a cracked TiN particle, the local stress at fracture ranges from 1537 to 1798 MPa, with an average value of 1666 MPa and a standard deviation of 79 MPa. The peak stress values normal to the mid-plane, as well as their location relative to the notch tip, are also reported for comparison. Similarly, Table 4 summarizes the local fracture stress and strain values in the CT test specimens, for all identified initiation sites, as well as their nature. It is seen that carbide cracking occurs under larger plastic strain and stress levels than TiN cracking: on average the local stress for cleavage initiation by TiN cracking is equal to 1930 MPa (with a standard deviation of 107 MPa), whereas it is 2342 MPa for the two results with carbide cracking, hence a difference of about 400 MPa. Note that the stress and strain values right at the crack tip (specimen G4H) were not computed because the FE solution is unlikely to be truly representative there.

Comparison of local stress values at fracture between the NT and CT geometry shows that much lower local stresses were required to trigger cleavage by TiN cracking in the NT tests (1666 MPa compared with 1930 MPa for the average critical local stress). The primary reason for this difference is that the larger plastic strains developed in the NT geometry plastically loads the TiN particles and therefore assists in their cracking.³¹ Another reason is the larger fracture process zone (FPZ) in the NT geometry, which makes it more likely to sample the most critical TiN particles present in 18MND5.

Synthesis and consequences on the modelling

Fractographic work revealed that TiN inclusions are predominantly responsible for cleavage initiation in the material of this study (although a competition between carbides and various brittle inclusions (oxydes, MnS) for initiating cleavage in RPV steels is often reported in the literature, cleavage initiation by carbide cracking generally remains preponderant^{12,32}, in contrast with the present material), as long as they are not prematurely broken through straining under insufficient local stress (as is the case in the NT specimens tested at $-150\text{ }^{\circ}\text{C}$). Although the overall fractographic features of cleavage initiation at cracked TiN particles are very similar in both the CT and NT geometries tested respectively at $-150\text{ }^{\circ}\text{C}$ and $-188\text{ }^{\circ}\text{C}$, there are notable differences in the local mechanical conditions. The critical local stress to propagate a microcrack formed out of a cracked TiN particle is on average 260 MPa lower in the NT geometry, while the accompanying plastic strain is 5 to 10 times larger. Although part of the differences in the critical local stress can be due to an increased likelihood to sample rare but highly deleterious particles in the NT geometry due to the larger FPZ, it is argued here that

a significant part of the shift is caused by the contribution of plastic strain in raising the particle's internal stress.

The choice was made in this study to concentrate on the main and most critical nucleation mechanism, i.e., that involving TiN particle cracking. Keeping in mind that the investigated TiN particles are those that led to cleavage, the combination of the locally applied stress and strain around the particle was sufficient to both break the particle and propagate the ferrite microcrack that was formed out of it. Assuming that cleavage obeys the critical stress criterion (independent of temperature, strain rate and constraint), the local critical stress in the NT geometry can be used to define the lower critical stress for propagation for both NT and CT geometries, represented by the threshold stress σ_{th} in the model. In accordance with the local stress values measured in the NT tests at -188°C , σ_{th} was fixed to 1500 MPa in this study (σ_{th} must be understood as a 'long range' critical stress to sustain the propagation of a microcrack once formed, rather than the stress (or energy) that is effectively needed to form the ferrite microcrack, to which the particle contributes more or less significantly on cracking). The much higher stress levels around the TiN particles in the CT geometry indicates that, in general, enough stress was already available locally for cleavage propagation, but the internal stress within the TiN particles still had to exceed a critical value. This critical value, most likely statistically distributed, will therefore be at least higher than the greatest local critical stress value recorded in the CT specimens, that is about 2120 MPa (this value is close to those obtained for a titanium-modified 4330 steel by Shabrov *et al.*,³⁰ estimated to be in the range of 2300 to 2400 MPa).

MODELLING

Constitutive equations

The experimental tension–compression tests on the NT geometry presented earlier revealed the presence of a small Baushinger effect during reverse loading. A von Mises rate independent elastoplastic behaviour with both isotropic and kinematic hardening was thus assumed for the material, whose yield function f is defined as

$$f(\sigma, X, R) = (\sigma - X)_{eq} - R - R_0,$$

where R represents the isotropic stress and X is the kinematic stress tensor. Nonlinear, Lemaitre–Chaboche's type,³³ saturating hardening laws were chosen to model the material

$$\begin{cases} \dot{R} = b(Q - R)\dot{p} \\ \dot{X}_{ij} = C\dot{\varepsilon}_{ij}^p - DX_{ij}\dot{p} \end{cases}$$

Table 5 Young's modulus, Poisson's ratio and identified hardening law coefficients used for 18MND5 steel

| | 20 °C | −100 °C | −150 °C | −196 °C |
|-----------------|---------|---------|---------|---------|
| E (MPa) | 205 300 | 208 900 | 211 100 | 213 600 |
| ν | | | 0.3 | |
| R_0 (MPa) | 455.5 | 539.6 | 673.3 | 907.4 |
| Q_1 (MPa) | 210.5 | 324.3 | 331.7 | 470.7 |
| b_1 | 27.26 | 12.16 | 8.74 | 3.51 |
| Q_2 (MPa) | | | 296.4 | |
| b_2 | | | 0.422 | |
| C_1/D_1 (MPa) | | | 73.5 | |
| D_1 | | | 13.5 | |
| C_2/D_2 (MPa) | | | 2.2 | |
| D_2 | | | 688.2 | |

where $\dot{p} = \sqrt{\frac{2}{3}\dot{\varepsilon}_{ij}^p\dot{\varepsilon}_{ij}^p}$ is the accumulated equivalent plastic strain rate and b , Q , C and D are material constants.

In order to describe the short- and long-range effects at the different temperatures, it was necessary to introduce two isotropic and two kinematic elementary variables, so that the experimental curves were eventually fitted according to

$$\begin{aligned} \sigma = & R_0 + Q_1(1 - \exp(-b_1 p)) + Q_2(1 - \exp(-b_2 p)) \\ & + \frac{C_1}{D_1}(1 - \exp(-D_1 \varepsilon^p)) + \frac{C_2}{D_2}(1 - \exp(-D_2 \varepsilon^p)), \end{aligned}$$

where ε^p is the axial plastic strain.

For simplicity, it was assumed that the temperature only affects the isotropic part of the flow curve. The temperature dependence of the flow curve was appropriately captured by making Q_1 and b_1 (which relate to short-range hardening) and R_0 temperature dependent. All other parameters were assumed to be temperature independent.

The values of the identified parameters are listed in Table 5. It is seen that the kinematic hardening is indeed mild, with a maximum contribution to the flow stress of 76 MPa. Furthermore, the second kinematic hardening law has very little incidence on the flow stress ($C_2/D_2 = 2.2$ MPa), and merely provides a finer response in the transition from elastic unloading to compressive yielding.

Figure 7 presents the experimental tension–compression curves, given in terms of radial contraction and applied load, together with the FE model response using the identified law. The latter was also compared with the experimental true strain–true stress curves at 20, -100 and -150°C (Fig. 8). Considering the slight variability in tensile test responses that is observed experimentally for 18MND5 steel, it is seen that there is a good agreement with both sets of experiments.

The modelling of the different cycles necessitates flow stress values at all temperatures between 20 and

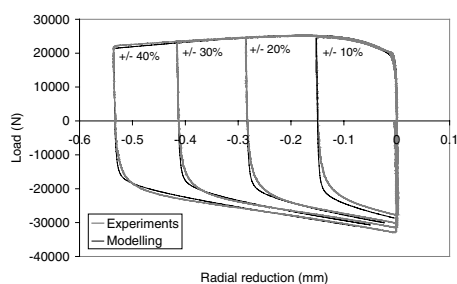


Fig. 7 Comparison of the experimental tension-compression curves at RT, given in terms of applied load versus radial contraction, together with the FE model response using the identified hardening law.

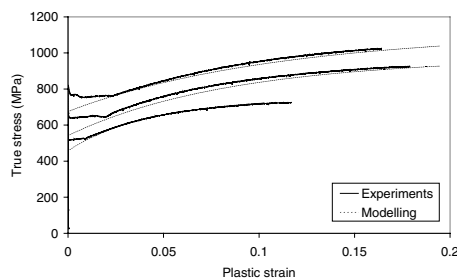


Fig. 8 Comparison of the identified hardening law at 20, -100 and -150 °C with the tensile test curves.

-150 °C. These values were provided by nonlinearly interpolating the three identified curves at 20, -100 and -150 °C, assuming the same exponential rate of increase with temperature as that of the yield strength, given below

$$\sigma_{ys}(T) = 498.1 + 1290.4 \exp(-0.0134(T + 273.15))$$

FE modelling

All the simulations were run using a general-purpose implicit FE code (ZeBuLon³⁴). The CT geometry was modelled using 2D quadratic elements with plane strain conditions, while the NT geometry was modelled using axisymmetric quadratic elements. Reduced integration was used for both FE models. Finite strain effects were accounted for within a finite-strain Lagrangian framework. Figure 9 presents a general view of the mesh of the CT specimen as well as the crack tip mesh configuration. The crack was treated as a very narrow notch with a semi-circular tip of radius 1 μm to accommodate blunting. Two to four micrometer long elements were used at the crack tip de-

pending on the applied loads. A 3D FE modelling with eight nodes linear hexahedral elements, not presented here, was also performed for some of the WPS cycles. For the small applied SIFs of this study, which meant that there was no significant loss of constraint at the crack tip, very similar results were obtained between the 2D and 3D modelling²⁶.

FE solutions of the crack tip stress distributions provide useful insight into explaining the differences in toughness benefits between the various WPS cycles. Figure 10 shows the distribution of the stress normal to the crack plane in the CT geometry assuming plane strain conditions, at different loading times (detailed in Fig. 10) of the LUCF cycle with $K_{wps} = 40 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ (dotted lines), compared to an isotropic loading to $K_{el} = 40 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ at -150 °C (solid line, $t = 0$). When comparing lines (0) and (3), it is observed that the peak stress at -150 °C for an applied SIF of 40 $\text{MPa}\sqrt{\text{m}}$ is higher following LUCF than for the isothermal case, due to work hardening of the crack tip plastic zone during the WPS. However, because of the building of residual compressive stresses on unloading (cf. line (2)), the FPZ, i.e., the zone of active plastic flow where $\sigma_1 > \sigma_{th}$, is significantly lower. The applied SIF has to be increased beyond 40 $\text{MPa}\sqrt{\text{m}}$ (line (4) versus (0)) for the FPZ volume of the LUCF cycle to become greater than that of the isothermal case. While the higher peak stress increases the probability of cleavage fracture compared with the isotropic loading, the lower FPZ volume decreases it. The experimental results suggest that, together with the deactivation of cleavage initiators by plastic straining (see next section), these opposite variations lead to a less critical combination of stress, strain and FPZ volume for the LUCF cycle than for the isothermal loading at the same applied SIF, hence the recorded toughness benefit following WPS. As it is shown in the last part of this paper, the new cleavage model predicts the same trend.

Figure 11 compares distributions of the stress normal to the crack plane between the LCF cycle with $K_{wps} = 50 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ and the LCIKF cycle with $K_{wps} = 60 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ and two different SIF increments ($\Delta K = 10$ and 20 $\text{MPa}\sqrt{\text{m}}$) at various loading steps detailed in Fig. 11. It is seen that the cooling phase of the LCF cycle leads to a slight decrease of the peak stress (line (1) versus (2)): this corresponds to an elastic unloading at the crack tip caused by the overall increase in the specimen's load bearing capacity through the increase of the yield stress during cooling, while the applied load is kept constant. This can also be understood considering that K_{el}^2 varies in proportion to $\sigma_{ys}\delta_{el}$ (cf. Eq. 1). The slight elastic unloading blocks plastic flow during the entire duration of the transient. Both the decrease in crack tip stress and the absence of active yielding theoretically exclude any risk of cleavage fracture during the LCF transient, in accordance with

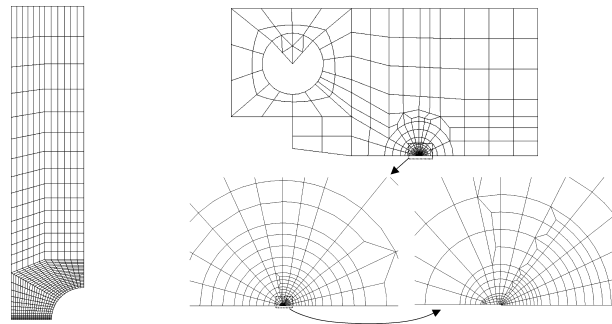


Fig. 9 Meshes of the NT and CT geometries used in the FE simulations. The mesh of the CT geometry employs 2 to 4 μm long elements at the crack tip. The root radius of the latter was fixed to 1 μm in all simulations.

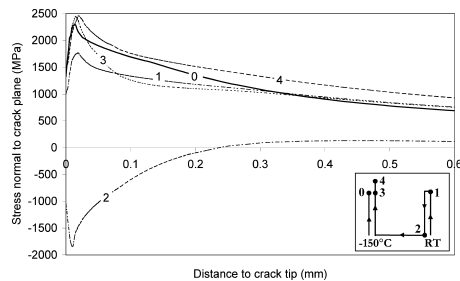


Fig. 10 Comparison of the stress normal to the crack plane for the isothermal (solid line) and LUCF cycle (dotted lines). The following list gives the temperature and applied SIF in $\text{MPa}\sqrt{\text{m}}$ for each loading time: Isothermal: 0(-150 °C, 40); LUCF: 1(RT, 40), 2(RT,0), 3(-150 °C,40), 4(-150 °C,50).

the experiments. Reloading to $60 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ at -150°C leads to a very steep increase in both peak stress and FPZ volume: this corresponds to specimens failing over a narrow toughness range, as observed experimentally. In the case of the LCIKF cycles, there is no elastic unloading for the considered SIF increments: comparing lines (3) and (2'), however, one notes the effect of crack tip blunting and loading paths, which leads the stress field at -150°C of the LCF cycle for $K_{\text{el}} = 60 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ to be very similar to that of the LCIKF cycle with $\Delta K = 10$ at the end of the transient (i.e., when $K_{\text{el}} = 70 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$). It is therefore expected, on average, a greater toughness benefit following WPS for the LCIKF cycle than for the LCF one, as verified experimentally, although the greater the ΔK , the higher is the probability of failing during the transient (cf. line (2') versus (2'')). All these aspects are further discussed in the last part dealing with the model predictions.

Presentation of the new cleavage model

The essential micromechanisms of cleavage fracture are well established and can be divided into two stages:^{5,28,35}

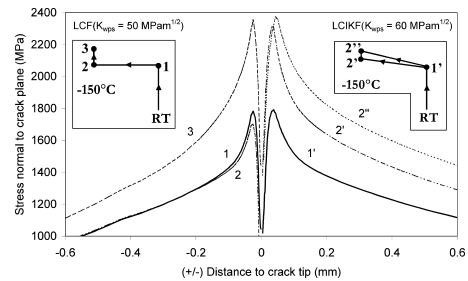


Fig. 11 Comparison of the stress normal to the crack plane for the LCF (lines 1, 2, 3) and LCIKF cycles (lines 1', 2', 2''). The following list gives the temperature and applied SIF in $\text{MPa}\sqrt{\text{m}}$ for each loading time: LCF: 1(RT, 50), 2(-150 °C, 50), 3(-150 °C, 60); LCIKF: 1'(RT, 60), 2'(-150 °C, 70), 2''(-150 °C, 80).

- The nucleation of a microcrack, most often at brittle grain boundary carbides and inclusions. In ferritic steels, it has been shown experimentally that plastic deformation (whether by slip or twinning) is a necessary precursor to microcrack formation.
- The propagation of the microcrack: a minimum critical stress needs to be applied locally to drive the crack across the matrix and the different microstructural barriers, such as the particle/matrix interface, grain boundaries etc.

Numerous micromechanical models of cleavage fracture have been proposed. Many of them derive from the seminal Beremin model,⁵ which expresses the probability of cleavage fracture as

$$P_f = 1 - \exp\left(-\left(\frac{\sigma_w}{\sigma_u}\right)^m\right), \quad (2)$$

where m and σ_u are material parameters and σ_w is the so-called Weibull stress defined as

$$\sigma_w^m = \int_{V_p(\sigma_m)} (\sigma_1^m - \sigma_{\text{th}}^m) \frac{dV}{V_0}, \quad (3)$$

where σ_1 is the maximum principal stress, σ_{th} is the threshold cleavage stress, V_p is the FPZ volume, here defined as the crack tip plastic zone region where $\sigma_1 > \sigma_{th}$ and V_0 is a reference volume.

This model has been recently amended by one of the authors to include the effect of plastic strain on the nucleation of microcracks and the deactivation of the latter if they are not immediately propagated.^{27,35} It is worth mentioning that Beremin originally introduced a strain correction to Eq. (3) to account for the increase of the cleavage stress with strain observed in the steel that they investigated (A508 class 3): it amounted to increase σ_u with strain while keeping all other assumptions unchanged, and it therefore differs from the new modifications presented here. In the new model, the probability of cleavage fracture is written as the probability of simultaneously reuniting the conditions for both microcrack nucleation and propagation. At a material point within the FPZ, the probability of cleavage fracture is defined as

$$P_{cleav}(t) = \int_0^t P_{propag} \cdot \delta P_{nucl},$$

where t represents the 'loading time'. Based on experimental evidence and by way of simplification, the probability of microcrack nucleation, at a material point within the FPZ, over a small plastic strain increment $d\epsilon_p$ is defined as

$$\delta P_{nucl} \propto N \cdot \sigma_{ys}(T, \dot{\epsilon}_p) \cdot d\epsilon_p = N_0 \cdot (1 - P_{nucl}) \cdot \sigma_{ys} \cdot d\epsilon_p, \tag{4}$$

where ϵ_p is the equivalent plastic strain, N and N_0 are respectively the remaining and initial number of cleavage nucleation sites within the nucleator population (nucleating particles subject to multiple cracking may contain several potential nucleation sites) and σ_{ys} is the yield strength at the test temperature T and strain rate $\dot{\epsilon}_p$. Because the temperature, and thus σ_{ys} , are not constant during the WPS cycles, P_{nucl} in Eq. (4) cannot generally be written as a closed form expression of ϵ_p , but has to be evaluated incrementally. Let $\sigma_{ys,0}$ be the yield strength at reference temperature T_0 and $\epsilon_{p,0}$ a reference plastic strain set so that

$$\delta P_{nucl} = P_{nucl}(t + \delta t) - P_{nucl}(t) = (1 - P_{nucl}(t)) \cdot \frac{\sigma_{ys}}{\sigma_{ys,0}} \cdot \frac{d\epsilon_p}{\epsilon_{p,0}}$$

P_{nucl} is calculated as follows:

$$\begin{cases} P_{nucl}(t) = 0, & t = 0 \\ P_{nucl}(t + \delta t) = P_{nucl}(t) + (1 - P_{nucl}(t)) \cdot \frac{\sigma_{ys}}{\sigma_{ys,0}} \cdot \frac{\epsilon_p(t + \delta t) - \epsilon_p(t)}{\epsilon_{p,0}}, & t > 0. \end{cases} \tag{5}$$

It is seen that $\epsilon_{p,0}$ fixes the microcrack nucleation rate with respect to plastic straining: the greater the $\epsilon_{p,0}$, the smaller is the δP_{nucl} for a given increment $d\epsilon_p$. For an isothermal loading under constant strain rate, Eq. (5) simplifies to the following closed form³⁵

$$P_{nucl}(t) = 1 - \exp\left(-\frac{\sigma_{ys}}{\sigma_{ys,0}} \cdot \frac{\epsilon_p(t)}{\epsilon_{p,0}}\right).$$

As for the Beremin model, assuming that the nucleated microcracks can be treated as Griffith flaws, size-distributed as an inverse power law, the probability of microcrack propagation is given by

$$P_{propag} \propto \sigma_1^m - \sigma_{th}^m.$$

Invoking the weakest-link principle over the FPZ volume, V_p , for which $\sigma_1 > \sigma_{th}$, the global cleavage probability, P_f , is expressed as a Weibull distribution

$$\begin{aligned} P_f &= 1 - \exp\left(-\int_{V_p} \int_0^t P_{propag} \cdot \delta P_{nucl} \cdot dV\right) \\ &= 1 - \exp\left(-\left(\frac{\sigma_w^*}{\sigma_u^*}\right)^m\right), \end{aligned} \tag{6}$$

where σ_u^* is a scaling parameter and σ_w^* is a modified Weibull stress defined as

$$\begin{aligned} \sigma_w^* &= \int_{V_p(\sigma_1 > \sigma_{th})} \left(\int_0^{\epsilon_p(t)} \frac{\sigma_{ys}}{\sigma_{ys,0}} (\sigma_1^m - \sigma_{th}^m) (1 - P_{nucl}(t)) \frac{d\epsilon_p}{\epsilon_{p,0}}\right) \\ &\quad \times \frac{dV}{V_0} \end{aligned} \tag{7}$$

where V_0 is a reference volume.

Calibration of the local approach parameters

Four parameters need to be calibrated in the model: m , σ_u^* , σ_{th} and $\epsilon_{p,0}$. On the basis of the fractographic study described earlier, the 10 tests at -188°C are considered representative of the cleavage micromechanisms in the CT geometry. Their number being too small to establish m with enough confidence, it was decided to calibrate the parameters using both the NT results at -188°C and the toughness results at -150°C on the virgin material.²⁶ The value of $\epsilon_{p,0}$ was established from the estimated local critical strains of Tables 3 and 4. The local measurements revealed that the difference of hydrostatic state between the NT and CT geometries leads to local fracture strains 5 to 10 times larger in the NT geometry than those in the CT geometry. To account for this difference within the existing frame of the model, it was decided to fix $\epsilon_{p,0}$, for each geometry, to the largest local fracture strains recorded in the actual test specimens, that is $\epsilon_{p,0} = 0.4\%$ at -150°C for the CT specimens and $\epsilon_{p,0} = 2\%$ at -188°C for the NT specimens. For a same temperature and loading rate, this means that the same fraction (for an isothermal and

quasi-static loading with $\sigma_{ys,0}$ fixed equal to σ_{ys} , this fraction is equal to 63.2%) of cleavage nucleation sites will have been activated at a material point when ε_p reaches 0.4% in the CT geometry and 2% in the NT geometry.

The calibration of σ_{th}^* was first attempted by fixing its value so that m and σ_{th}^* , calibrated from the NT test results using an iterative procedure similar to that described by Minami *et al.*³⁶ and estimated by the maximum likelihood method, were such that in the CT geometry

$$\sigma_w^*(K_0(-150^\circ\text{C})) = \sigma_{th}^*(\text{NT}),$$

where K_0 is the toughness value corresponding to a cleavage fracture probability of 63.2%. It was however not possible to match the σ_{th}^* -values of the NT and CT geometries. One must not conclude that no actual set exists. The small number of NT tests leads to a great uncertainty in the estimated m -value, which in turn affects the estimation of σ_{th}^* . The latter is much less sensitive than m to the number of test results and can usually be determined with confidence from a relatively small data set.³⁷ Examination of Table 3 shows that both the mean and local fracture stress values of the NT tests have little scatter: 10 tests seem therefore sufficient to provide a confident estimate of σ_{th}^* , given that m is correctly estimated.

In a second attempt, σ_{th} was set to 1500 MPa, in accordance with the local measurements presented earlier. The second calibration method consisted simply of calculating σ_{th}^* from the NT test data by maximum likelihood method for an assumed value of m . The m -value was then altered until the condition $\sigma_w^*(K_0(-150^\circ\text{C})) = \sigma_{th}^*(\text{NT})$ was met. The advantage of the method is that confidence on the m -value is gained by calibrating from two very different geometries, while σ_{th}^* is confidently calibrated from the NT tests. The following estimates were obtained, with V_0 set to 1 mm^3 : $m = 29.8$ and $\sigma_{th}^* = 1446\text{ MPa}$.

The calibrated m is relatively high compared with values determined for an offshore structural steel²⁷ (Grade 450EMZ), of the order of 10. The difference may possibly be explained by the very different nature of the nucleating particle, namely sub-micronic grain boundary carbides for 450EMZ and large TiN particles (several microns in size) in 18MND5 steel. The recent work of Shabrov *et al.*³⁰ emphasized that TiN particles tend to crack over a very narrow range of applied stress, that would be compatible with a high m -value. Here the local fracture stress range is about 250 MPa in the NT geometry and 350 MPa for the CT geometry, which is not especially small. Consequently, before more physical justification can be provided, these parameters are at this stage regarded as phenomenological.

TOUGHNESS PREDICTIONS FOLLOWING WPS

Figure 12 compares the experimental toughness results for all cycles with the predicted scatter between the 5 and 95% fracture probability bounds. Although the model is supposed to predict cleavage initiated by TiN cracking only, all experimental toughness results can serve as reference values. Indeed, considering that cleavage initiated at a carbide potentially prevented cleavage initiation from a TiN particle, the corresponding toughness value represents a lower bound to the value that would have been recorded if no critical carbide had been present. The same kind of reasoning applies to toughness results for which the nucleation conditions could not be determined, with the difference that a TiN particle may effectively be the initiating particle. Note that all model parameters, included $\varepsilon_{p,0}$ (set to 0.4% for $\sigma_{ys,0} = \sigma_{ys}(-150^\circ\text{C})$), were fixed for all cycles: only the yield strength varies with temperature. It is seen that the model is able to follow the

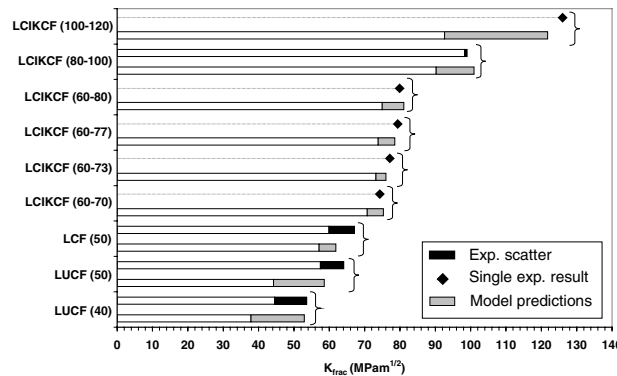


Fig. 12 Comparison between experimental scatter and 5 to 95% predicted scatter band for all cycles. Number in brackets on the Y-axis give the value of K_{wps} and targeted SIF at -150°C in $\text{MPa}\sqrt{\text{m}}$. Predictions plotted here for LC1KCF cycles (60–70) and (60–73) are those based on the FE solutions using the experimental reloading temperatures (that is -140.4°C and -145.0°C , respectively).

experimental trend between the different WPS cycles and that the predictions, albeit over-conservative, are overall in good agreement with the toughness test results (note that for LCIKF cycles with $K_{wps} = 60 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ and targeted K_{el} -values of 70 and 73 $\text{MPa}\sqrt{\text{m}}$ at -150°C , which were prematurely reloaded during the tests, the actual reloading temperatures (i.e., -140.4°C and -145.0°C , respectively) were used in the FE simulations). Several interesting observations can be made:

- The model predicts that, for both LUCF cycles, there is a non-negligible probability ($>5\%$) for the specimen to fail at a reloading SIF at -150°C lower than K_{wps} . Published LUCF cycle test results indicate that there is indeed a small probability for such occurrence, although this was not observed in the present experiments²⁶. Note that in the case of the LCIKF cycle with $K_{wps} = 100 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$, the model predicts a small fracture probability during the pre-stressing stage itself ($P_f = 7.6\%$ when $K_{\text{applied}} = K_{wps}$).
- The predicted toughness scatter range of the different WPS cycles is small, in good correspondence with the experimental results. The range of the predicted toughness scatter depends on many factors, notably the nature of the cycle, the absolute K_{wps} -value and the phase of the cycle during which the 5% fracture probability is reached (e.g. whether this occurs during the WPS, during the transient, characterized by a finite slope $(-\Delta K/\Delta T)$, or during the reloading phase at -150°C , for which this slope is infinite).
- For the LCIKF cycles with $K_{wps} = 60 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$, both experimental results and predictions show a shift of the 5% fracture probability toughness towards higher values as the slope $(-\Delta K/\Delta T)$ increases. This is expected as the first part of the transient can be considered as an additional WPS, and the higher the slope $(-\Delta K/\Delta T)$, the more the material is strained at high temperature.

From the experimental results, it is clear that the steeper the transient, the higher the likelihood to break during the transient. Figure 13 shows the predicted fracture probability at the end of the transient, when the applied SIF reaches the target K_{el} at -150°C . One observes that a very small fracture probability (0.8%) is attributed to the cycle with $\Delta K = 10 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$, but becomes significant (34%) for $\Delta K = 20 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$, in good correspondence with the experiments. More than the absolute values of these probabilities, which likely overestimate the actual fracture probabilities due to the model's over-conservatism, what is noticeable is the strong exponential-like variation of the fracture probability before reaching -150°C when varying the steepness of the transient. Note also that a very small probability is predicted for the LCIKF cycle with $\Delta K = 0$ (which is equivalent to an LCF cycle with $K_{wps} = 60 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$), because some stress within the plastic zone exceeded σ_{th} during the WPS at high temperature.

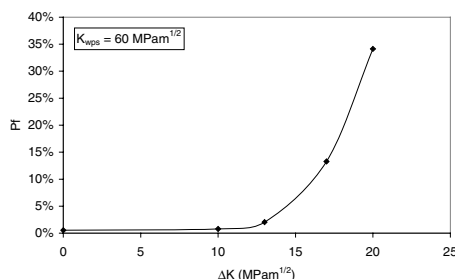


Fig. 13 Fracture probability of the LCIKF cycle with $K_{wps} = 60 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ at the end of the transient at -150°C (when $K_{\text{applied}} = K_{wps} + \Delta K$) as a function of ΔK .

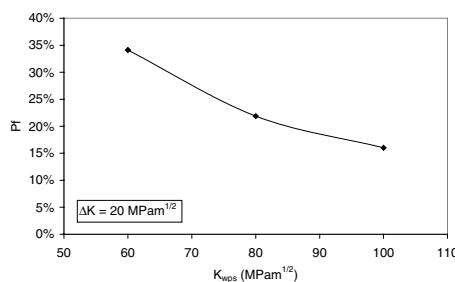


Fig. 14 Fracture probability of the LCIKF cycle with $\Delta K = 20 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ at the end of the transient at -150°C (when $K_{\text{applied}} = K_{wps} + \Delta K$) as a function of K_{wps} .

Concerning the effect of the WPS level on the criticality of the LCIKF cycle, Fig. 14 is a plot of the predicted fracture probability for $K_{wps} = 60, 80$ and $100 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$, with a same SIF increment $\Delta K = 20 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$. Again, placing more attention on the relative evolution of the probabilities rather than on their absolute values, it is seen that the greater the K_{wps} , the more likely it becomes that the specimen survives the transient. This trend is in line with the experimental results, since the only test specimen that survived the transient with $\Delta K = 20 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ is the specimen with the highest K_{wps} (i.e., $100 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$). Note that there may exist an optimum value of K_{wps} beyond which the benefits of WPS at low temperature start diminishing. For 18MND5 steel, it was observed that cleavage can start from zones of ductile growth and/or micro-ductility at grain boundaries. An excessive value of K_{wps} will induce ductile damage (e.g. holes) and/or ductile tearing at high temperature which may then be detrimental at low temperature.

EXPLAINING THE MODEL'S CONSERVATISM

Figure 12 shows that the model is consistently over-conservative for all WPS cycles, which, if preferable from a structural integrity point of view, nonetheless requires comprehension so as to give keys for improving the model. Several reasons can be advanced to explain the model's conservatism:

- First, it must be pointed out that the model is inherently conservative, as it assumes statistical homogeneity in the material, which is all the more pessimistic as the number of nucleating particles within the FPZ is scarce.
- A second reason may be an incomplete account of the change in nucleation mechanisms due to the WPS. The NT tests at $-150\text{ }^{\circ}\text{C}$ demonstrated that large tensile strains under insufficient tensile stress allow for the premature breaking of TiN particles without inducing large-scale cleavage, whereas the same particles would have been critical at a lower temperature. All WPS toughness cycles in this study involved large tensile pre-straining at the crack tip during the WPS, so that a lower efficiency at nucleating critical microcracks is expected in the WPS-affected zone. If setting $\varepsilon_{p,0}$ to different values in the CT and NT geometries, when calibrating the model parameters, allowed correcting for constraint effects on cleavage nucleation, this does not necessarily mean that the chosen $\varepsilon_{p,0}$ -value for the CT geometry fully reflected the WPS-induced changes on the microcrack nucleation rate.
- A third reason may concern the over-simplified modelling of temperature effects on the material's hardening law. In the present simulation, the latter are accounted for by simply interpolating the isotropic part of the isothermal hardening laws at 20, -100 and $-150\text{ }^{\circ}\text{C}$, using the same rate of increase with temperature as that of the yield strength. In other words, it is assumed that after say 10% tensile straining at $20\text{ }^{\circ}\text{C}$, the material, cooled down to $-150\text{ }^{\circ}\text{C}$, will follow the same hardening curve as the material strained to 10% in tension at $-150\text{ }^{\circ}\text{C}$. In reality, the structure and interaction of dislocations may significantly differ whether the material was initially strained to 10% at 20 or $-150\text{ }^{\circ}\text{C}$. Furthermore, the direction of pre-strain may also affect subsequent straining at low temperature more than what is imposed by the kinematic component of the hardening law. In Fig. 10, for $K_{\text{applied}} = 40\text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ at $-150\text{ }^{\circ}\text{C}$, the higher peak stress obtained for the LUCF cycle than for the isothermal loading is not unexpected for 18MND5 steel, whose hardening is essentially isotropic. The question resides in knowing whether or not the difference in the peak stress value between the isothermal and LUCF cycle is over-estimated or not: if it is over-estimated, this would partly explain the model's conservatism. This assertion is corroborated by the results in Fig. 12 which show that, in general, the more the material is work-hardened, the

more the model is conservative. Furthermore, the fact that the model appears significantly more conservative for the LUCF cycle with $K_{\text{wps}} = 50\text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ than for the LUCF cycle with $K_{\text{wps}} = 40\text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ may also be indicative of an insufficient account of the effect of directionality on material hardening and/or nucleation mechanisms on reloading at low temperature.

- Finally, a last reason for the model's conservatism may simply be the over-simplified statistical treatment of the cleavage nucleation stage, written in the model as a function of the yield strength and plastic strain only (Eq. 4). The present test results suggest that the effects of constraint and direction of pre-strain, notably, should be better accounted for, keeping in mind that their modelling must then be suitably incorporated within the statistical framework.

CONCLUSION

In this paper, the WPS effect on the cleavage fracture of an 18MND5 (A533B) RPV steel was investigated. Several loading cycles between RT and $-150\text{ }^{\circ}\text{C}$ were considered in this work: LUCF, LCF and LCIKF. All experiments complied with the conservative principle, which states that no fracture will occur if the applied SIF decreases (or is held constant) while the temperature at the crack-tip decreases, even if the fracture toughness of the virgin material is exceeded. The experimental results indicated that an effective WPS effect is present even at small pre-load ($K_{\text{wps}} = 40\text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$), and that a minimum critical slope ($-\Delta K/\Delta T$) has to be exceeded to induce cleavage fracture during cooling between RT and $-150\text{ }^{\circ}\text{C}$, which further supports the conservative principle. On the investigated range, $K_{\text{wps}} = 60$ to $100\text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$, both experimental data and model predictions suggested that for $K_{\text{wps}} = 60\text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$, an increment of $\Delta K = 10\text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ between RT and $-150\text{ }^{\circ}\text{C}$ was safe. They also indicated that the higher the K_{wps} , the lower the fracture probability for a given transient slope ($-\Delta K/\Delta T$) and temperature. Hence the increment $\Delta K = 10\text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ is normally valid on the investigated range $K_{\text{wps}} = 60$ to $100\text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$. It is however argued that excessively raising K_{wps} may induce alternative cleavage nucleation mechanisms and thus reduce the toughness benefits following WPS.

The new cleavage model, proposed by one of the authors^{27,35}, was calibrated from NT tests at $-188\text{ }^{\circ}\text{C}$ and toughness test results at $-150\text{ }^{\circ}\text{C}$. In order to account for constraint effects on cleavage initiation, the reference strain $\varepsilon_{p,0}$ was set to different values in the CT and NT geometries. Using local stress and strain measurements to set the values of the threshold cleavage stress σ_{th} and $\varepsilon_{p,0}$ enabled the calibrated model to satisfactorily describe all WPS cycles, although it remained

slightly over-conservative. Possible reasons for this over-conservatism may include the relative scarceness of the TiN particles within the crack-tip plastic zone, as well as an incomplete account of the loading path effects on the microcrack nucleation mechanisms and material hardening law.

REFERENCES

- 1 Yukawa, S. (1969) Evaluation of periodic proof testing and warm prestressing procedures for nuclear reactor vessels. General Electric Report HSSTP-TR-1.
- 2 Nichols, R. W. (1968) The use of overstressing techniques to reduce the risk of subsequent brittle fracture, Parts 1 and 2. *Br. Weld. J.* **15**, 21–42 and 75–84.
- 3 Pickles, B. W. and Cowan, A. (1983) A review of warm prestressing studies. *Int. J. Press. Vessels Pip.* **14**, 95–131.
- 4 Smith, D. J. and Garwood, S. J. (1990) The significance of prior overload on fracture resistance: A critical review. *Int. J. Press. Vessels Pip.* **41**, 255–296.
- 5 Beremin, F. M. (1981) Numerical modelling of warm prestress effect using a damage function for cleavage fracture. In: *Advances in fracture research*, ICF5 Conf. (Edited by François, D. et al.), vol. 2, pp. 825–832.
- 6 Reed, P. A. S. and Knott, J. F. (1996) Investigation of the role of residual stress in the warm pre-stress (WPS) effect: part I – experimental. *Fatigue Fract. Eng. Mater. Struct.* **19**, 485–500.
- 7 Reed, P. A. S. and Knott, J. F. (1996) Investigation of the role of residual stress in the warm pre-stress (WPS) effect: part II – analysis. *Fatigue Fract. Eng. Mater. Struct.* **19**, 501–513.
- 8 Roos, E., Alsmann, U., Elsässer, K., Eisele, U. and Seidenfuss, M. (1998) Experiments on warm prestress effect and their numerical simulation based on local approach. In: *ECF 12 - Fracture from Defects* (Edited by Brown, M. W., de los Rios, E. R. and Miller, K. J.). EMAS Publishing, London, pp. 939–944.
- 9 Stöckl, H., Bösch, R., Schmitt, W., Varfolomeyev, I. and Chen, J. H. (2000) Quantification of the warm prestressing effect in a shape welded 10 MnMoNi 5-5 material. *Eng. Fract. Mech.* **67**, 119–137.
- 10 Kordisch, H., Bösch, R., Blauel, J. G., Schmitt, W. and Nagel, G. (2000) Experimental and numerical investigations of the warm pre-stressing (WPS) effect considering different load paths. *Nucl. Eng. Des.* **198**, 89–96.
- 11 Chen, J. H., Wang, V. B., Wang, G. Z. and Chen, X. (2001) Mechanism of effects of warm prestressing on apparent toughness of precracked specimens on HSLA steels. *Eng. Fract. Mech.* **68**, 1669–1686.
- 12 Lefevre, W., Barbier, G., Masson, R. and Rousselier, G. (2002) A modified Beremin model to simulate the warm pre-stress effect. *Nucl. Eng. Des.* **216**, 27–42.
- 13 Smith, D. J., Hadidimoud, S. and Fowler, H. (2004) The effects of warm pre-stressing on cleavage fracture. Part 1: Evaluation of experiments. *Eng. Fract. Mech.* **71**, 2015–2032.
- 14 Smith, D. J., Hadidimoud, S. and Fowler, H. (2004) The effects of warm pre-stressing on cleavage fracture. Part 2: Finite element analysis. *Eng. Fract. Mech.* **71**, 2033–2051.
- 15 Hadidi-Moud, S., Mirzaee-Sisan, A., Truman, C. E. and Smith, D. J. (2004) A local approach to cleavage fracture in ferritic steels following warm pre-stressing. *Fatigue Fract. Eng. Mater. Struct.* **27**, 931–942.
- 16 Chell, G. G., Haigh, J. R. and Vitek, V. (1981) A theory of warm prestressing: Experimental validation and the implications for elastic plastic failure criteria. *Int. J. Fract.* **17**, 61–81.
- 17 Curry, D. A. (1981) A micromechanistic approach to the warm pre-stressing of ferritic steels. *Int. J. Fract.* **17**, 335–343.
- 18 Smith, D. J. and Garwood, S. J. (1990) Application of theoretical methods to predict overload effects on fracture toughness of A533B. *Int. J. Press. Vessels Pip.* **41**, 333–357.
- 19 Ritchie, R. O., Knott, J. F. and Rice, J. R. (1973) On the relationship between critical tensile stress and fracture toughness in mild steel. *J. Mech. Phys. Solids* **21**, 395–410.
- 20 Wallin, K. (2003) Master Curve implementation of the warm pre-stress effect. *Eng. Fract. Mech.* **70**, 2587–2602.
- 21 Beremin, F. M. (1983) A local criterion for cleavage fracture of a nuclear pressure vessel steel. *Metall. Trans. A* **14A**, 2277–2287.
- 22 Lefevre, W. and Barbier, G. (1999) MPA - EDF's collaboration on the warm pre-stress effect, final report, part one: Characterisation of the 18MND5 steel. EDF report no. HT-2C/99/048/A.
- 23 Lefevre, W. and Barbier, G. (1999) MPA - EDF's collaboration on the warm pre-stress effect, final report, part two: Warm pre-stressing tests and numerical simulations. EDF report no. HT-2C/99/050/A.
- 24 RCC-M (2000) Design and construction rules for mechanical components of PWR reactor nuclear island. AFCEN, FR.
- 25 ASTM E1921-98. (1998) Standard test method for determination of reference temperature, T_0 , for ferritic steels in the transition range. ASTM standards.
- 26 Bordet, S. R. and Tanguy, B. (2005) Simulation of the WPS effect in a RPV steel. Internal report. Centre des Matériaux, Ecole des Mines de Paris.
- 27 Bordet, S. R., Karstensen, A. D., Knowles, D. M. and Wiesner, C. S. (2005) A new statistical local criterion for cleavage fracture in steel. Part II: Application to an offshore structural steel. *Eng. Fract. Mech.* **72**, 453–474.
- 28 Hahn, G. (1984) The influence of microstructure on brittle fracture toughness. *Metall. Trans. A* **15A**, 947–959.
- 29 Brückner-Foit, A., Munz, D. and Trollenier, B. (1991) Micromechanical implications of the weakest link model for the ductile–brittle transition region. In: *Defect assessment in components—fundamentals and applications* (Edited by Blauel, J. G. and Schwalbe, K.-H.).ESIS/EGF9, Mechanical Engineering Publications, London, pp. 477–488.
- 30 Shabrov, M. N., Sylven, E., Kim, S., Sherman, D. H., Chuzhoy, L., Briant, C. L. and Needleman, A. (2004) Void nucleation by inclusion cracking. *Metall. Mater. Trans. A* **35**, 1745–1755.
- 31 Beremin, F. M. (1981) Cavity formation from inclusions in ductile fracture of A508 steel. *Metall. Trans. A* **12A**, 723–731.
- 32 Yang, W. -J., Lee, B. -S., Oh, Y. -J., Huh, M. -Y. and Hong, J. H. (2004) Microstructural parameters governing cleavage fracture behaviors in the ductile–brittle transition region in reactor pressure vessel steels. *Mater. Sci. Eng. A* **379**, 17–26.
- 33 Lemaitre, J. and Chaboche, J. -L. (1994) *Mechanics of Materials*. Cambridge University Press, Cambridge, UK.
- 34 Besson, J. and Foerch, R. (1997) Large scale object-oriented finite element code design. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* **142**, 165–187.

- 35 Bordet, S. R., Karstensen, A. D., Knowles, D. M. and Wiesner, C. S. (2005) A new statistical local criterion for cleavage fracture in steel. Part I: Model presentation. *Eng. Fract. Mech.* **72**, 435–452.
- 36 Minami, F., Brückner-Foit, A., Munz, D. and Trolldenier, B. (2002) Estimation procedure for the Weibull parameters used in the local approach. *Int. J. Fract.* **54**, 197–210.
- 37 Gao, X., Ruggieri, C. and Dodds, R. H. Jr. (1998) Calibration of Weibull stress parameters using fracture toughness data. *Int. J. Fract.* **92**, 175–200.

V. Transition ductile-fragile des aciers bainitiques

V.1. Introduction

Les aciers ferritiques de structure cubique centrée présentent un domaine de transition ductile–fragile. La durée de vie des structures, utilisant ces aciers, sollicitées dans ce domaine de température est particulièrement difficile à appréhender, puisqu'elle résulte de la compétition entre deux modes de rupture.

De nombreux matériaux industriels, notamment les aciers de construction, présentent une transition ductile-fragile dans les conditions de fonctionnement, ou leur fragilisation au cours du temps les y amènera. Historiquement la transition ductile-fragile est caractérisée par un essai de flexion par choc³⁷, l'essai de résilience ou essai Charpy³⁸ (Russell, 1898; Charpy, 1901). Cet essai consiste à impacter une éprouvette entaillée à l'aide d'un pendule qui a une certaine vitesse de sollicitation au moment de l'impact et à mesurer l'énergie absorbée (énergie CVN, pour "Charpy V-Notch energy", exprimée en Joules) par l'éprouvette en fonction de la température de l'essai, définissant la courbe dite de résilience. La figure 29 montre la courbe de résilience obtenue pour l'acier 16MND5(1) et les aspects des faciès de rupture en fonction du domaine de température où les essais sont réalisés (Tanguy, 2001)*. Malgré son

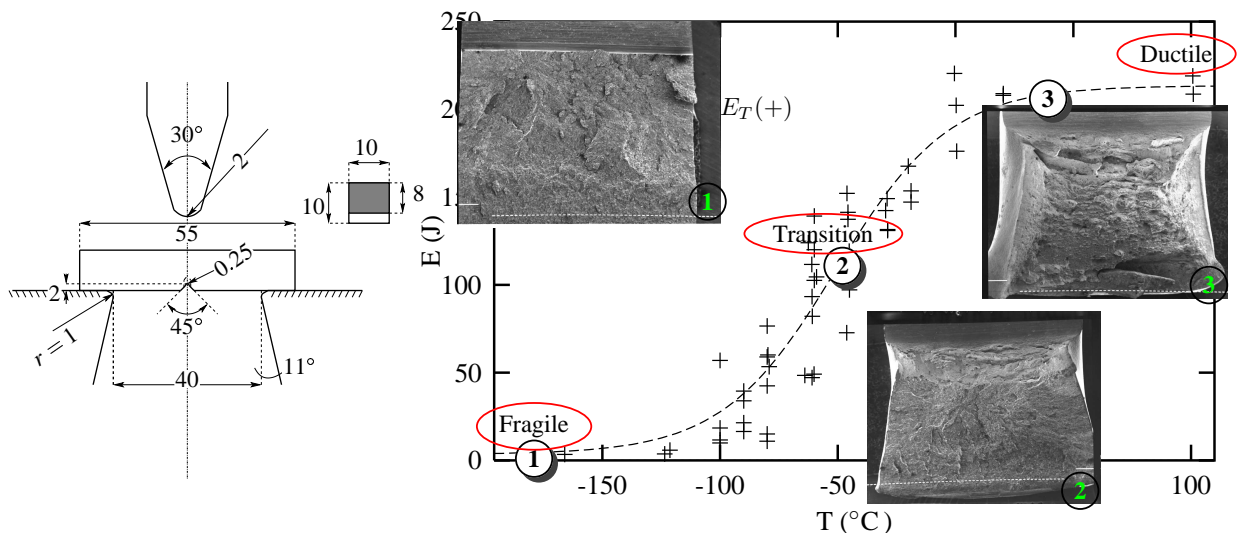


Figure 29: Courbe de résilience obtenue pour l'acier 16MND5(1) et dimensions du montage et de l'éprouvette Charpy.

utilisation fréquente dans l'industrie, les grandeurs issues de cet essai technologique sont très difficiles à utiliser pour le dimensionnement vis-à-vis de l'intégrité d'une structure fissurée. Plusieurs corrélations empiriques ou semi-empiriques ont été proposées afin de déterminer la ténacité d'un matériau à partir de la courbe de résilience. Les plus communes sont rappelées dans (Tanguy, 2001)*. On se référera par ailleurs au livre édité à la suite de la conférence du centenaire de l'essai Charpy, à laquelle j'ai participé

³⁷L'histoire du développement de cet essai est décrit dans (Tanguy, 2001)*.

³⁸Cet essai est aujourd'hui décrit dans des normes européennes (AFNOR-10045-1, 1990; AFNOR-10045-2, 1992) et américaine (ASTM-E23, 1992).

à l'organisation, qui s'est tenue en 2001 (François and Pineau, 2002).

La modélisation de l'essai Charpy dans la transition ductile-fragile et le passage résilience-ténacité ont fait l'objet de mes travaux de thèse (Tanguy, 2001)*. La complexité des phénomènes à modéliser et les moyens de calcul encore limités à la fin de ces travaux (2001) nous avaient conduits à introduire des simplifications, principalement au niveau du maillage, qui n'était que $2D1/2$. L'augmentation des puissances de calcul et le développement du code utilisé, ZeBuLon, nous ont conduit à poursuivre ces travaux afin de raffiner la modélisation de l'essai Charpy et à développer un outil numérique, notamment pour prévoir l'effet de la fragilisation par irradiation sur le décalage des courbes de résilience et de ténacité. La démarche adoptée dans ces dernières études consiste à utiliser l'approche locale de la rupture pour prévoir l'évolution de la ténacité avec la température à partir des courbes de résilience, pour différents niveaux d'irradiation.

Cette partie décrit dans un premier temps mes travaux sur la modélisation de la courbe de résilience, dans la transition ductile-fragile et sur le palier haut de la courbe de résilience, et le passage résilience-ténacité. Les phénomènes complexes inhérents à la transition ductile-fragile y seront présentés. Nous présenterons ensuite comment cet outil numérique a été utilisé pour interpréter le décalage de la courbe de résilience dû à la fragilisation par l'irradiation, et proposer une prévision du décalage des courbes de ténacité. Enfin nous terminerons par une discussion sur l'évolution des mécanismes physiques du clivage dans la transition ductile-fragile.

V.2. Modélisation de l'essai de résilience et passage résilience/ténacité

Les articles de synthèse de cette étude de la transition ductile-fragile (Tanguy et al., 2005b; Tanguy et al., 2005a)* sont reportés à la fin de cette partie.

L'essai de choc sur mouton-pendule Charpy est un essai dynamique ; selon l'énergie initiale du pendule, la vitesse du marteau au moment de l'impact est comprise entre 5 et 5.8 m.s^{-1} , où les conditions de contact entre l'éprouvette et le marteau, et l'éprouvette et les appuis, jouent un rôle important. Peu d'études se sont intéressées à la modélisation de l'essai Charpy avec une démarche de compréhension des phénomènes physiques et de confrontation aux données expérimentales. Dans le palier bas de la courbe de résilience (rupture fragile par clivage), on citera les travaux de Rossoll (Rossoll, 1998; Rossoll et al., 1999) et ceux de Tahar (Tahar, 1998) (Tahar et al., 1998)*. Pour ma part, je me suis intéressé à la modélisation de l'essai Charpy dans la transition ductile-fragile et sur le palier haut de la courbe de résilience. Lorsque j'ai travaillé sur la modélisation de l'essai Charpy, les études en traitant dans la transition, avec une démarche de confrontation aux données expérimentales, étaient essentiellement issues de trois équipes au niveau international (Rossoll, 1998; Schmitt et al., 1994b; Sainte-Catherine et al., 2001). Depuis, cette approche a été développée en France comme support R&D dans l'industrie électronucléaire (Parrot et al., 2006).

Le premier objectif des travaux menés était de déterminer quels étaient les *ingrédients* indispensables pour modéliser l'essai Charpy, dans le but de prévoir le déclenchement du clivage après le développement de l'endommagement ductile, c'est-à-dire d'un point de vue purement mécanique, d'obtenir une description appropriée des champs mécaniques locaux. Mes travaux ont été menés initialement sur l'acier de cuve 16MND5(1) pour prévoir la courbe de résilience dans la transition ductile-fragile. Les

outils et méthodes développés ont ensuite été utilisés dans la thèse de T.T. Luu pour modéliser la rupture complètement ductile des éprouvettes Charpy en acier X100.

V.2.1. Où l'expérience guide la modélisation

Pour traiter de la modélisation de l'essai Charpy, j'ai dans un premier temps, conduit une démarche expérimentale originale afin de décrire les différents phénomènes impliqués dans cet essai et notamment dans la transition ductile–fragile. La question de la prise en compte du caractère dynamique³⁹ de l'essai dans la transition avait été traitée dans (Tahar, 1998; Rossoll, 1998); ils ont montré que les effets inertiels sur l'état mécanique local étaient négligeables dans la zone plastique en fond d'entaille où se déroule le processus de rupture par clivage. Une modélisation quasi-statique rapide, c'est-à-dire avec une loi de comportement décrivant la sensibilité du matériau à la vitesse de déformation, est donc suffisante. La démarche expérimentale et les résultats obtenus sont décrits dans (Tanguy et al., 2000b; Tanguy, 2001; Tanguy et al., 2001; Tanguy et al., 2005b)*. Les principaux résultats expérimentaux obtenus sur l'acier 16MND5(1) sont rappelés ici :

- Au cours de l'essai, il se produit une élévation de température importante en fond d'entaille. A partir d'essais de résilience *interrompus*, nous avons mesuré des élévations jusqu'à 160°C pour des niveaux d'énergie autour de 85 J, représentatifs de ceux rencontrés dans la transition (fig. 30d). Ces mesures sont en accord avec les valeurs obtenues par la conversion de l'énergie en chaleur (Norris, 1979).
- Contrairement à beaucoup d'aciers doux de structure, l'effet de la vitesse de sollicitation n'est pas apparent sur la température de transition ductile–fragile de l'acier 16MND5. Trois courbes de résilience ont été établies avec des vitesses de marteau différentes, en quasi-statique ($1\mu\text{ms}^{-1}$), à vitesse intermédiaire ($500\mu\text{ms}^{-1}$) et à la vitesse du mouton pendule (5.2ms^{-1}). Les températures de transition ductile–fragile de ces trois courbes sont très proches.
- L'énergie au palier ductile dépend sensiblement de la vitesse de sollicitation, elle est d'autant plus élevée que la vitesse de sollicitation est importante.
- Une relation bi-univoque a été mise en évidence entre l'avancée de la déchirure ductile et l'énergie CVN. Cette relation dépend de la vitesse de sollicitation. Pour une énergie donnée, l'avancée ductile est d'autant plus faible que la vitesse de sollicitation est importante.
- Sur ce type de géométrie (éprouvette Charpy), l'avancée de la déchirure ductile est plus importante au centre de l'éprouvette que sur les bords (effet "tunneling").
- Les niveaux de déformation plastique en fond d'entaille sont de l'ordre de 100%, avec une décroissance rapide lorsqu'on s'éloigne de l'entaille (fig. 30a). Les mesures expérimentales de la déformation plastique ont été réalisées par la technique de recristallisation des grains et l'utilisation d'une courbe d'étalonnage entre la taille de grain et la déformation plastique, déterminée à partir d'essais où la déformation est homogène (Tanguy et al., 2000b; Tanguy, 2001; Tanguy et al., 2001)*.

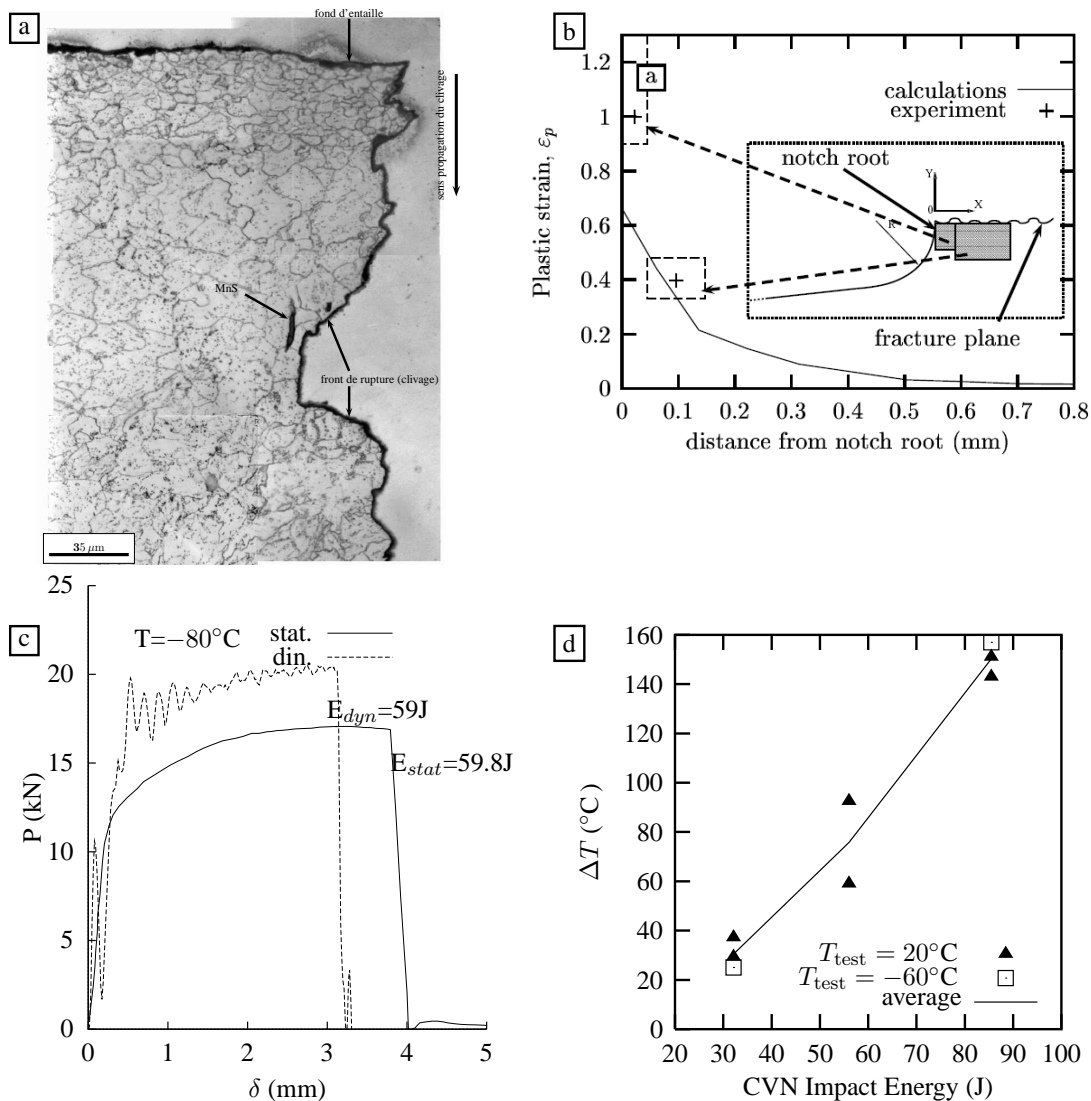


Figure 30: Illustration des résultats expérimentaux obtenus lors de l'étude sur la modélisation de l'essai Charpy pour l'acier 16MND5(1) : a) visualisation de la déformation en fond d'entaille d'une éprouvette Charpy à l'aide de la technique de recristallisation, b) comparaison entre les déformations plastiques mesurées et calculées, c) effet de la vitesse de sollicitation sur l'évolution de la charge pour une même énergie CVN à rupture, d) mesure expérimentale de l'élévation de température en fond d'entaille. (Tanguy et al., 2000b; Tanguy, 2001; Tanguy et al., 2001)*.

Ces résultats expérimentaux nous ont permis de définir les *ingrédients* indispensables pour traiter de la modélisation de l'essai Charpy : (i) une loi de comportement élastoviscoplastique paramétrée en température et identifiée à partir d'essais permettant d'atteindre des niveaux importants de déformation plastique (géométrie NT) (Tanguy et al., 2000a)*, (ii) la prise en compte de l'échauffement en température résultant de la forte déformation plastique et de la vitesse de sollicitation élevée en fond d'entaille; les conséquences d'une modélisation isotherme sur les champs mécaniques locaux ont été

³⁹Cette terminologie est utilisée au sens des effets inertiels.

évaluées par comparaison avec une modélisation adiabatique, (iii) une modélisation 3D dans la zone où la déchirure ductile se développe.

De plus, il apparaît que l'énergie CVN n'est pas la grandeur qu'il faut utiliser pour valider la modélisation, il faut utiliser des grandeurs plus représentatives des phénomènes rencontrés pendant l'essai. En effet, une même énergie peut résulter de comportements très différents, comme illustré sur la figure 30c. La modélisation a été validée par confrontation des résultats de la simulation aux données expérimentales suivantes : les courbes charge-déflexion de l'éprouvette obtenues à partir de l'instrumentation du marteau par des jauges de déformation, la longueur et la forme du front de l'avancée ductile en fonction de l'énergie CVN, et la déformation plastique en fond d'entaille. Les comparaisons entre données expérimentales et résultats de la simulation de la déchirure ductile ont été décrites dans la partie consacrée à l'endommagement ductile de ce mémoire (chapitre III.).

V.2.2. Prévision de la transition ductile-fragile

A partir de l'étude expérimentale de l'essai Charpy et de confrontations entre les simulations numériques et les données expérimentales, les *ingrédients* nécessaires à la prévision du clivage par un critère en contrainte principale (modèle de Beremin) sont (Tanguy et al., 2005a) :

- une simulation élasto-visco-plastique sans prise en compte des effets inertiels,
- un calcul tridimensionnel,
- la modélisation des contacts,
- la prise en compte des échauffements locaux par l'hypothèse d'adiabaticité; cette hypothèse devient approximative au delà de 100 J, alors un calcul avec diffusion de la chaleur serait plus adapté,
- la modélisation de la déchirure ductile précédant le déclenchement du clivage.

La détermination des probabilités de rupture par clivage dans la transition ductile-fragile est basée dans un premier temps sur l'hypothèse d'un couplage faible entre les évolutions propres à la transition (élévation de la température, développement de l'endommagement ductile) et le clivage : ces évolutions affectent les champs mécaniques locaux, mais le mécanisme de clivage n'est pas modifié intrinsèquement par l'endommagement ductile qui le précède et/ou par l'augmentation de la température. Une fois validée la capacité de notre modélisation à prédire correctement la déchirure ductile dans la transition (voir le chapitre III. l'endommagement ductile et (Tanguy et al., 2005a)), la probabilité de rupture par clivage, décrite par le modèle de Beremin, est calculée à chaque température. Les paramètres sont déterminés à l'aide d'essais menés sur des géométries de traction entaillées (NT), à basses températures ($[-196^{\circ}\text{C} : -150^{\circ}\text{C}]$), et l'examen des faciès de rupture ne révèle pas un rôle prépondérant des inclusions de MnS dans l'amorçage du clivage. Un premier résultat important est que cette méthodologie conduit à une prévision correcte des énergies CVN dans la partie basse de la transition, c'est-à-dire jusqu'à une température de -80°C pour l'acier 16MND5(1), en accord avec les résultats obtenus dans (Rossoll, 1998). Au delà, la modélisation sous-estime fortement les données expérimentales, ce qui veut dire que, pour un niveau d'énergie donnée, la modélisation surestime la probabilité de rupture,

et de façon plus marquée pour les essais Charpy dynamiques que statiques. La difficulté de prévoir le déclenchement du clivage dans la transition à partir des résultats obtenus dans le domaine du clivage pur a également été reportée par les autres équipes qui se sont intéressées à la modélisation de la transition ductile-fragile (Rossoll et al., 1999; Bernauer et al., 1999).

Cela nous a conduits à proposer une dépendance *apparente* en température du paramètre σ_u du modèle de Beremin (Tanguy et al., 2002)* de façon similaire à (Lefevre et al., 2002). L'augmentation du paramètre σ_u avec la température n'implique pas forcément une augmentation de la contrainte de clivage avec la température, ce peut être interprété comme une modification des champs mécaniques locaux (par un mécanisme de micro-plasticité fonction de la température) autour de la micro-fissure de clivage (Lefevre et al., 2002).

La variation locale de la température en avant de la déchirure ductile, qui peut être de 20 à 30°C là où la contrainte est maximale, doit être prise en compte dans l'évaluation de la probabilité de rupture, ce qui conduit à une modification du modèle de Beremin (Tanguy et al., 2005a)*. Le modèle de Beremin modifié est décrit par les relations suivantes :

$$P_R(t) = 1 - \exp(-\Omega(t)) \quad (27)$$

$$\omega = (\sigma_I / \sigma_u(T))^{m(T)} \quad (27a)$$

$$\tilde{\omega} = \max_{\tau \in [0, t], \dot{p}(\tau) > 0} \omega(\tau) \quad (27b)$$

$$\Omega(t) = \int_{V_t} \tilde{\omega}(t) dV / V_0 \quad (27c)$$

où V_t est le volume total. Les effets de l'histoire du chargement et de la variation de température sont décrits par la relation (27b). La relation (27a) signifie que la probabilité de rupture élémentaire est représentée par le paramètre ω et non plus par σ_I comme dans le modèle de Beremin original. Par simplification, seul le paramètre σ_u a été considéré comme dépendant de la température, et le paramètre m a été supposé constant. L'indépendance du paramètre m vis-à-vis de la température a par ailleurs également été admise dans plusieurs études visant à prévoir le clivage dans le domaine de la transition ductile-fragile (Hausild et al., 2005; Gao et al., 2006; Wasiluk et al., 2006). L'évolution de σ_u avec la température est déterminée à partir des essais Charpy dynamiques. Elle est donnée sur la figure 31a. Cette modélisation a ensuite été appliquée avec succès, en conservant la relation $\sigma_u(T)$, pour prévoir la courbe de résilience établie en quasi-statique (Tanguy et al., 2005a)* et la courbe de ténacité dans la transition ductile-fragile (Tanguy et al., 2006b)* comme illustré sur la figure 31b. Sur cette dernière figure, où les niveaux de ténacité correspondant à une déchirure ductile de 0.2 et 0.5 mm pour chaque température ont été reportés, on montre que la modélisation de la déchirure ductile n'est pas nécessaire lorsqu'on s'intéresse à la prévision de la ténacité pour des valeurs inférieures à $200\text{-}250 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$.

La méthodologie proposée dans ces travaux, utilise la modélisation de l'essai Charpy pour interpréter la courbe de résilience dans la transition ductile-fragile. Cette approche a permis, à partir d'essais réalisés à basses températures, de prévoir la courbe de résilience jusqu'à des énergies moyennes de 70J, énergies supérieures au niveau de 56J utilisé pour prévoir le décalage de la courbe enveloppe de ténacité dans le programme de surveillance des centrales nucléaires françaises. Aussi cette approche permet de prévoir directement la courbe de ténacité jusqu'à une valeur moyenne de $100 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$, classiquement utilisée pour calculer les décalages des courbes de ténacité (Approche Master-Curve (ASTM-E1921,

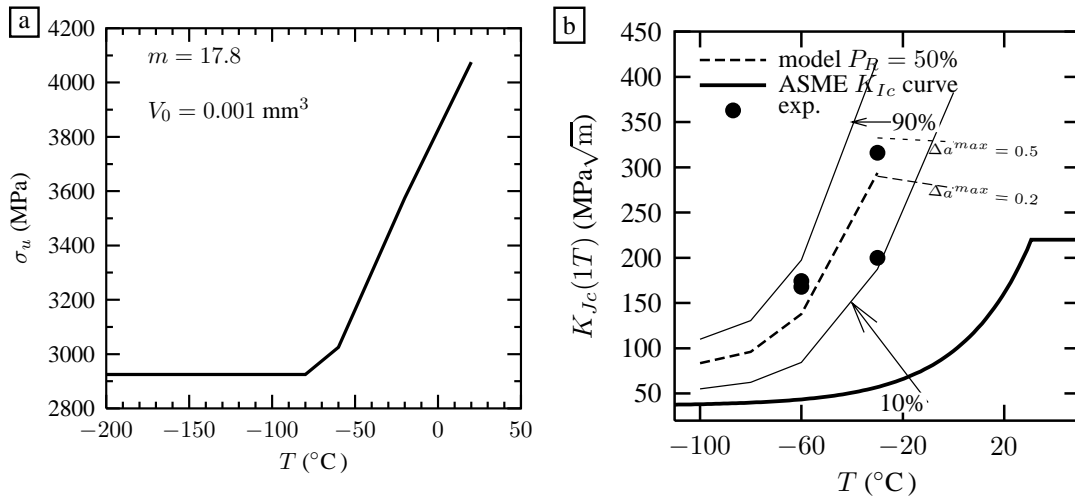


Figure 31: Modélisation de la transition ductile-fragile pour l'acier 16MND5(1) : a) dépendance du paramètre σ_u avec la température pour une valeur $m = 17.8$ fixée (Tanguy et al., 2005a)*, b) prévision de la ténacité en utilisant $\sigma_u(T)$ (Tanguy et al., 2006b)*, les isoprobabilités de rupture 10%, 50% et 90% sont reportées. les niveaux de ténacité correspondant à une déchirure ductile Δa^{max} de 0.2 et 0.5 mm aux différentes températures sont indiqués par des lignes pointillées.

2001). Au delà de ces valeurs, il convient d'introduire une dépendance du paramètre σ_u avec la température. Cette dépendance est déterminée à partir des essais Charpy et utilisée pour prévoir avec succès la ténacité dans tout le domaine de la transition ductile-fragile.

V.3. Discussion sur le clivage dans la transition

Nos travaux sur la prévision du clivage après une propagation ductile (sur éprouvette Charpy et sur éprouvette fissurée dans la transition ductile-fragile) ont conduit à introduire une dépendance phénoménologique en température du paramètre σ_u du modèle de Beremin pour pouvoir prévoir la remontée brusque des données expérimentales dans la partie médiane et haute de la transition pour la résilience et la ténacité (Tanguy, 2001; Tanguy et al., 2002; Tanguy et al., 2005a)*. La robustesse de la modélisation proposée pour décrire le comportement des structures étudiées (plasticité + déchirure ductile) est confortée par plusieurs études (voir par ex. (Petti and Dodds Jr., 2005; Hausild et al., 2005; Gao et al., 2006; Wasiluk et al., 2006; Forget et al., 2006)) qui arrivent à la même conclusion bien qu'ayant adopté des stratégies de modélisation différentes.

Dans le cadre du formalisme du modèle de Beremin, c'est à dire pour un mécanisme de clivage contrôlé par la propagation d'un défaut critique, la dépendance de σ_u à la température ne peut provenir que d'une dépendance à la température de l'énergie effective de création de surface, γ_{eff} et donc de la contrainte critique de clivage (voir eq. 17b) et/ou de la modification de la distribution de taille des défauts à l'origine du clivage. Dans ce dernier cas, cette modification peut être de différentes natures. Ces différents cas sont discutés ci-dessous.

V.3.1. Dépendance en température de l'énergie de surface effective ?

Une dépendance de l'énergie de surface effective, γ_{eff} (au sens de Griffith), avec la température est proposée par plusieurs auteurs. Elle résulte souvent d'un ajustement aux données expérimentales de ténacité (Wallin, K. and Saario, T. and Törrönen, K., 1984; Wasiluk et al., 2006). Néanmoins cela contredit les nombreuses études sur les aciers ferrito-perlitiques et bainitiques (Gibson et al., 1991) qui montrent, par une méthode indirecte⁴⁰, l'indépendance de γ_{eff} avec la température et avec la vitesse de déformation. Lorsqu'elle est utilisée, la variation de l'énergie effective avec la température est justifiée par un mécanisme de micro-plasticité thermiquement activé au niveau des empilements de dislocations, comme le glissement dévié. Suivant cette idée, la modification des micro-mécanismes de plasticité avec la température devrait également conduire à une variation de la contrainte seuil de déclenchement du clivage, σ_{th} , avec la température. Ceci n'est pas confirmé par les résultats de l'étude de C. Bouchet sur l'acier 16MND5(2) pour les éprouvettes fissurées (CT) dans la bas de la transition (voir figure 25a), ni par l'étude de Le Corre (Le Corre, 2006) sur un acier C-Mn sur des éprouvettes fissurées (CT) dans la transition ductile-fragile, mais a été rapporté pour un acier de cuve à partir d'essais sur éprouvettes Charpy (Rossoll, 1998). La variation avec la température de la contrainte seuil de déclenchement du clivage a été utilisée par (Faleskog et al., 2004; Kroon et al., 2008) qui ont modifié leur modèle de clivage original (Kroon and Faleskog, 2002) en introduisant, sans support expérimental, une dépendance du paramètre σ_{th} avec la température afin de pouvoir représenter les données expérimentales de ténacité dans la transition ductile-fragile.

V.3.2. Evolution de la distribution des défauts critiques avec la température ?

On considère ici, pour une même population de défauts, l'évolution de la distribution des défauts critiques avec la température. Cette idée a été avancée par (Gibson et al., 1991) pour un acier de cuve A508⁴¹ pour expliquer l'augmentation de la ténacité dans le bas de la transition. Sur le matériau étudié, les carbures de fer ont été identifiés majoritairement comme responsables de l'amorçage du clivage. La propension à fissurer des carbures de fer diminue quand la température augmente, par un mécanisme de micro-plasticité : l'activation de la montée et du glissement dévié des dislocations et la relaxation de la contrainte locale qui en résulte inhibent la fissuration des carbures. Pourtant l'hypothèse de l'activation du glissement dévié dans le haut de la transition est remise en cause pour l'acier 16MND5 par des études microstructurales fines (Roberston et al., 2007) qui montrent, dans cette microstructure bainitique, que le glissement dévié est actif dès les basses températures et les faibles niveaux de déformation (~2.5%).

A une échelle mésoscopique, et avec les connaissances actuelles de la plasticité cristalline dans la bainite, qui restent encore prospectives, des calculs polycristallins ont été réalisés (Mathieu, 2006; Libert, 2007) pour l'acier 16MND5. Les carbures de fer γ sont considérés comme responsables de l'amorçage du clivage. Ils sont explicitement modélisés dans (Mathieu, 2006) alors qu'un milieu biphasé (ferrite + cémentite) est décrit dans (Libert, 2007). Ces deux études mettent en avant l'évolution de l'hétérogénéité des contraintes avec la température, qui se traduit par une évolution de la distribution des défauts critiques avec la température et la triaxialité des contraintes. La rupture par clivage répondant toujours à un

⁴⁰La valeur de γ_{eff} est obtenue via l'équation (12), par la mesure de la taille du défaut identifié à l'origine du clivage et par le calcul de la contrainte locale.

⁴¹Désignation américaine de l'acier 16MND5.

mécanisme de type Griffith, c'est-à-dire en supposant que les microfissures existent dans la matrice, lorsque la température augmente, il est montré que ce ne sont plus les plus gros carbures qui ont la plus forte contribution à la probabilité de rupture. Il ressort ainsi que la nocivité de ces défauts est réduite quand la température augmente. On met ainsi en évidence la double origine de la dispersion des données expérimentales aux basses températures : les hétérogénéités spatiales du champ des contraintes et la modification de la distribution de taille des défauts critiques. Cependant l'introduction d'une dépendance en température de la contrainte de clivage via l'énergie de surface effective du défaut critique est toujours nécessaire pour représenter les données expérimentales (Mathieu, 2006), ce qui affaiblit l'hypothèse d'une évolution du paramètre $\sigma_u(T)$ due à l'évolution des hétérogénéités des contraintes avec la température. Par ailleurs, au stade de leur développement actuel, ces calculs, très consommateurs en place mémoire, représentent une transition de plasticité sur un élément de volume, sans endommagement ductile préalable, ni description d'une fissure. L'extrapolation des résultats à la transition ductile-fragile, où la plasticité sera beaucoup plus importante et les hétérogénéités lissées, notamment pour les géométries entaillées, est assez délicate.

A l'échelle macroscopique, la "consommation" des carbures par la déchirure ductile, notamment par la germination de cavités lors de l'endommagement, va entrer en compétition avec la rupture par clivage. Si le rôle des carbures dans le clivage est admis, la population des défauts critiques en est affectée. Cette idée a été avancée par (Koers et al., 1995) puis par (Xia and Shih, 1996; Bernauer et al., 1999) qui ont proposé de modifier l'expression de la probabilité de rupture en conséquence. L'idée d'une évolution de la population de défauts "actifs" avec le niveau de déformation plastique, que l'on trouve dans le modèle de Bordet, est également avancée par Bernauer, mais contrairement aux modèles postérieurs, l'hypothèse d'une décroissance de la germination des microfissures de clivage quand la déformation plastique augmente a été retenue sans succès. Récemment (Kroon et al., 2008) ont repris cette idée de compétition entre mécanismes et ont introduit une diminution de la germination de microfissures de clivage à partir d'une déformation plastique seuil représentative de l'amorçage de la déchirure ductile. Cependant cet effet seul n'est pas suffisant pour décrire correctement les données expérimentales, Kroon introduit également une augmentation de cet effet lorsque la température augmente, via un paramètre $c(T)$. Suivant ces études, c'est donc la compétition entre le critère de décohésion interface/matrice et le critère de rupture interne de la particule qui va contrôler le déclenchement du clivage.

Le modèle de Bernauer propose une relation entre le nombre de carbures désactivés et la fraction volumique de cavités obtenue à partir des lois de germination des modèles d'endommagement ductile (voir fig.13 du chapitre III.). Si ce mécanisme est confirmé, la compréhension de la transition ductile-fragile passe par le critère de germination autour des carbures et la compétition décohésion à l'interface / rupture de la particule ainsi que leur dépendance avec la température et la triaxialité.

L'obtention d'une cinétique de germination en fonction des champs mécaniques locaux et de la température a été un des objectifs de nos travaux en cours sur les essais de traction ex-situ à l'ESRF (European Synchrotron Radiation Facility) en collaboration avec E. Maire (MATEIS, Insa Lyon). Ces travaux ont été initiés dans la cadre du post-doc de S. Billard sur des aciers de structures bainitiques avec différentes populations d'inclusions (Billard et al., 2007). Le contraste entre les carbures et la matrice n'étant pas assez important pour que cet outil de tomographie donne de bons résultats, des coulées de laboratoires avec différentes populations d'inclusions ont été examinées. Les données informatiques

seront prochainement analysées.

Par ailleurs, le rôle des carbures dans la rupture par clivage dans la transition fait aujourd'hui débat pour les aciers bainitiques. Certains auteurs avancent que, lorsque la température augmente, l'amorçage sur particules n'est plus le mécanisme de déclenchement du clivage mais mettent en avant le rôle d'un mécanisme de plasticité cristalline (Hausild et al., 2005). Nos observations montrent plutôt un rôle croissant des joints de grains dans le bas de la transition lorsque la température augmente, puis de l'endommagement ductile lorsque la rupture par clivage est précédée d'une déchirure ductile. Cet effet est illustré sur la figure 32a qui montre l'évolution de la position du site d'amorçage par rapport au front de fissure⁴² pour les éprouvettes fissurées en acier 16MND5(2) qui ont été testées dans la thèse de C. Bouchet (Tanguy et al., 2006c)*. Lorsque l'endommagement ductile est très faible, une relation linéaire croissante existe entre la position du site d'amorçage et la ténacité. Cette relation a également été observée dans l'étude post-doctorale de S. Bordet (Bordet et al., 2006a)*. Lorsque l'étendue de l'endommagement ductile s'étend sur une distance supérieure à 350 μm , la relation linéaire n'est plus vérifiée, avec une partie des sites qui sont amorcés au droit de l'endommagement ductile et une partie très en avant de la déchirure. Ce "rapprochement" du site d'amorçage du clivage de la déchirure ductile a également été clairement observé sur la géométrie Charpy testée en quasi-statique (Tanguy, 2001)* (fig. 32b), les sites étant nettement plus proches de la déchirure ductile que pour les essais dynamiques. On notera également sur la figure (fig. 32b) la présence de fissures de clivage isolées dans la déchirure ductile.

V.3.3. Modification de la nature de la population des défauts critiques avec la température ?

On considère ici la modification de la nature des particules impliquées dans l'amorçage du clivage. L'implication croissante des amas de sulfure de manganèse dans la transition ductile–fragile quand la température augmente a été reportée sur un acier de cuve 16MND5 avec une teneur en soufre deux fois supérieure à celles des aciers de cuve 16MND5 que nous avons étudiés (Renevey, 1997; Carassou, 2000). Un modèle statistique décrivant la distribution des contraintes critiques, σ_c^{MnS} au niveau de ces amas a été proposé (Carassou, 2000), mais la description de la transition ductile–fragile nécessite d'introduire une dépendance en température de σ_c^{MnS} . Par ailleurs, les aciers 16MND5 de nos études ont une teneur faible en soufre, et manifestent une implication très minoritaire des amas de MnS, pourtant ils présentent une transition ductile–fragile, ce qui écarte l'hypothèse que ces amas puissent contrôler la transition ductile–fragile. Il est cependant probable qu'ils jouent un rôle dans la dispersion expérimentale.

V.3.4. Modification de l'étape critique qui contrôle le clivage avec la température ?

On considère ici pour une population de défauts critiques (par ex. les carbure de fer) la modification de l'entité microstructurale critique qui contrôle la rupture avec la température. Les entités microstructurales qui sont susceptibles de contrôler la rupture par clivage sont l'interface particule rompue/matrice et/ou l'interface matrice/matrice (voir la figure 20 du chapitre IV.) Cette hypothèse est décrite dans le modèle statistique proposé par (Martín-Meizoso et al., 1994) pour les aciers bainitiques.

⁴²Cette position est mesurée par rapport au front ductile ou à celui de la préfissuration par fatigue lorsque l'endommagement ductile n'existe pas.

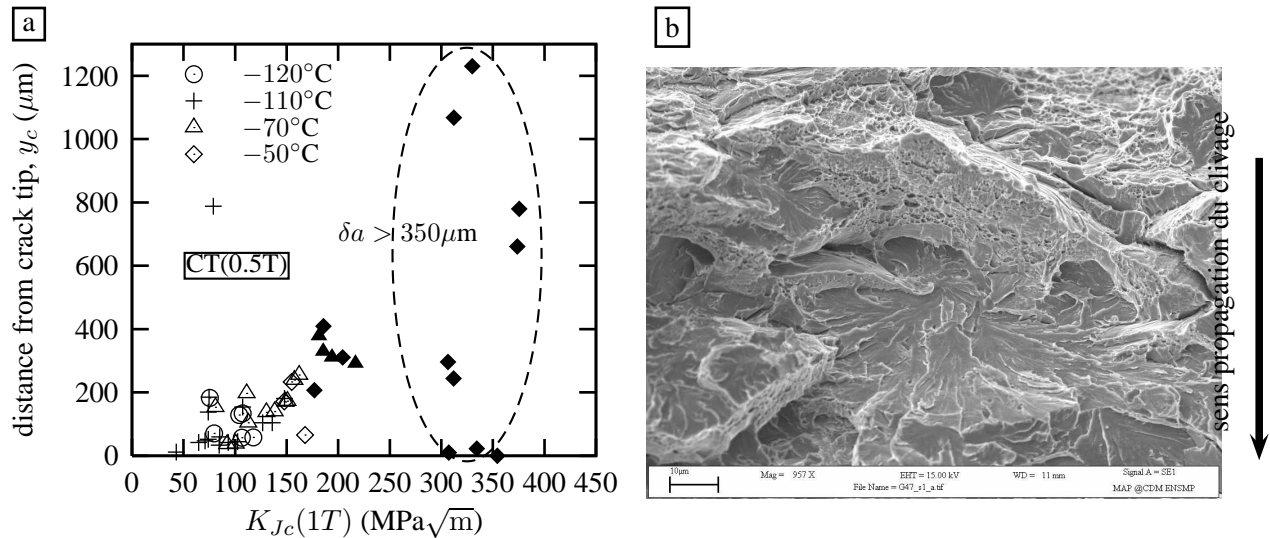


Figure 32: Effet de la déchirure ductile sur la position du site à l'amorçage du clivage : a) essais de ténacité sur géométrie CT12.5 fissurée pour l'acier 16MND5(2) (Tanguy et al., 2006c)*, b) amorçage au droit de l'endommagement ductile sur géométrie Charpy testée en quasi-statique, $T = -80^\circ\text{C}$, $E = 40 \text{ J}$ pour l'acier 16MND5(1) (Tanguy, 2001)*. Des facettes de clivage isolées au milieu de la déchirure ductile sont visibles en haut de l'image.

Ce modèle décrit classiquement le clivage comme la succession de trois étapes (voir paragraphe IV.2.1. au chapitre IV.); la résistance de chaque interface particule/matrice et interface matrice/matrice est caractérisée par une ténacité locale à l'arrêt, $K_{Ia}^{i/j}$. A nouveau, une dépendance en température de $K_{Ia}^{i/j}$ doit être introduite afin de pouvoir décrire les données expérimentales de ténacité. Ce modèle a été adapté pour décrire la ténacité des zones affectées thermiquement (ZAT) d'aciers haute résistance faiblement alliés où des essais interrompus sur des éprouvettes volumiques ont permis de mettre en évidence des arrêts de fissure de clivage aux interfaces entre paquets bainitiques fortement désorientés (Lambert-Perlade et al., 2004). Pour cette microstructure, où les particules élémentaires sont des composés Martensite/Austénite dont le critère de fissuration est une contrainte critique, c'est la résistance de l'interface matrice/matrice qui augmente avec la température. On peut également considérer que la résistance au franchissement des joints des grains soit une fonction croissante de la température. Le modélisation proposée permet de rendre compte des valeurs de ténacité dans le bas de la transition ductile-fragile.

La mise en évidence de la variation de la ténacité locale à l'arrêt des interfaces avec la température dans l'acier 16MND5 n'a pas été effectuée clairement à ce jour. Une façon de la mettre en évidence est d'identifier des fissures de clivage d'une taille de plusieurs paquets bainitiques qui seraient arrêtées. Dans le bas de la transition, il est cependant impossible d'identifier ces facettes à partir de l'examen post-mortem des faciès de rupture. Des coupes transversales mettent en évidence des fissures de clivage secondaires qui sont situées de part et d'autre du faciès de rupture. Des mesures par EBSD permettent de confirmer que ce sont les paquets bainitiques qui présentent des fortes désorientations

qui sont susceptibles de dévier ou d'arrêter une fissure secondaire de la taille de plusieurs paquets (fig. 33) (Tanguy, 2001)*, confirmant les résultats de (Brozzo et al., 1977) pour l'acier de cuve.

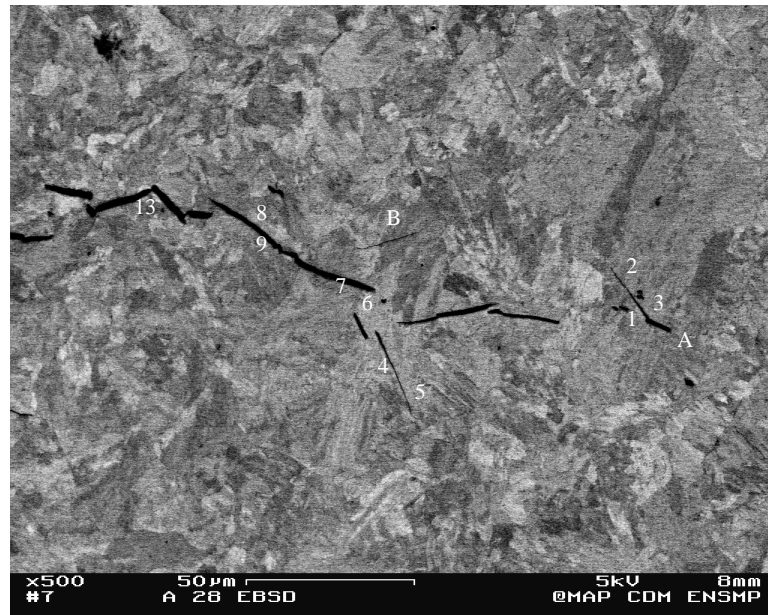


Figure 33: *Microfissures de clivage en électrons rétrodiffusés sous la fissure de clivage principale. Acier 16MND5(1). Coupe longitudinale d'une éprouvette de résilience, CVN=11J, T = -100°C.(Tanguy, 2001)**

Cependant dans la transition ductile–fragile, des examens à partir de coupes perpendiculaires au faciès de rupture ne révèlent pas la présence de ces fissures secondaires sous le front de déchirure ductile précédant le déclenchement du clivage (Hausild et al., 2005; Siegele et al., 2006), ce qui indiquerait que les fissures en avant de la déchirure ductile ne sont que la conséquence de l'énergie libérée par le déclenchement de la fissure principale. L'arrêt de ces fissures secondaires sur des paquets bainitiques de fortes désorientations reflète ainsi uniquement la forte probabilité qu'une fissure s'arrête sur les barrières énergétiques les plus hautes. Il faut néanmoins considérer avec prudence l'absence d'observations de fissures de clivage arrêtées dans la phase de déchirure ductile à partir de coupes métallographiques, car ces coupes ne reflètent qu'un plan d'observation, et aucune étude n'a rapporté d'investigations systématiques tout le long du faciès de rupture pour l'acier bainitique 16MND5.

Dans la transition ductile–fragile, nos observations sur les faciès de rupture de fissures de clivage isolées dans la déchirure ductile ou dans la zone très déformée en avant de l'entaille ou de la fissure soulèvent la question d'un renforcement des interfaces matrice/matrice dû au développement de la microductilité en avant de la fissure principale. Des exemples de ces fissures arrêtées observées par nous-mêmes sont donnés sur la figure 34 : dans l'acier 22NiMoCr37, une fissure de clivage de la taille de plusieurs anciens grains austénitiques, dans la déchirure ductile (fig. 34a) ou en avant de la déchirure (fig. 34c) (Tanguy et al., 2003b; Tanguy and Siegele, 2002)*; dans l'acier 16MND5(1), avec une fissure de taille plus faible, en avant de l'endommagement ductile (fig. 34b) (Tanguy et al., 2005b)*.

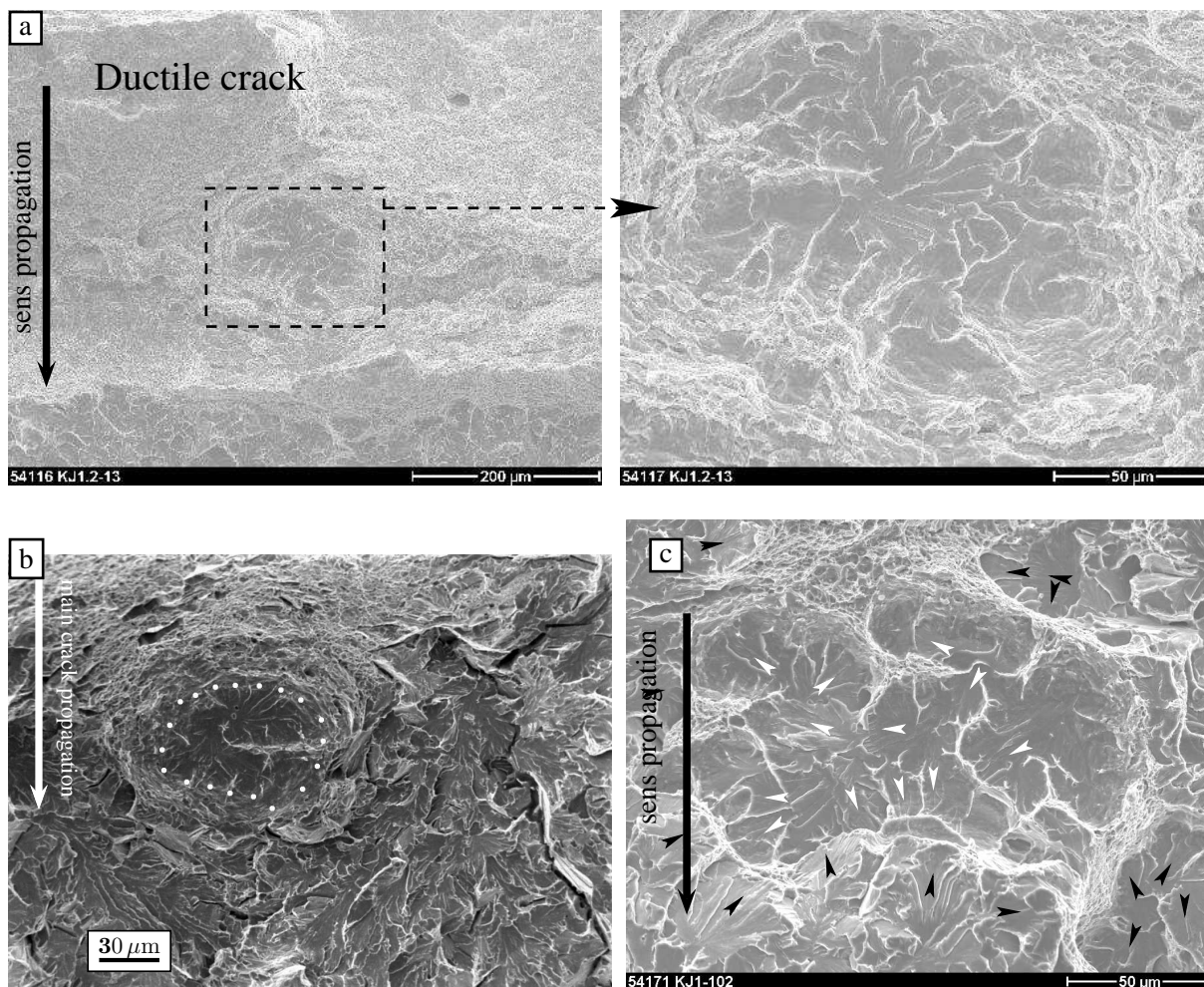


Figure 34: *Fissures de clivage isolées sur des faciès de rupture. a) Acier 22NiMoCr37, géométrie Charpy, $T=-40^{\circ}\text{C}$, $E=37\text{ J}$, b) acier 16MND5, géométrie Charpy, $T=-80^{\circ}\text{C}$, $E=60\text{ J}$, c) acier 22NiMoCr37, géométrie fissurée CT(1T), $T=-30^{\circ}\text{C}$, $K_{Jc}=152\text{MPa}\sqrt{\text{m}}$ (Tanguy et al., 2003b; Tanguy and Siegele, 2002)*.*

L'impossibilité de conclure définitivement sur un lien entre ces fissures arrêtées et l'évolution de l'entité microstructurale avec la température nous a conduit à réaliser des essais interrompus sur des éprouvettes Charpy fissurées PCVN⁴³ en acier 22NiMoCr37. Un chargement K_J de $150\text{MPa}\sqrt{\text{m}}$ a été appliqué à -50°C , puis les éprouvettes ont été déchargées et fissurées en fatigue. L'examen du faciès de rupture par microscopie électronique à balayage révèle une fissure de clivage arrêtée (fig. 35b), qui s'est amorcée au cours du chargement et qui s'est émoussée avec la poursuite du chargement mécanique macroscopique jusqu'à $150\text{MPa}\sqrt{\text{m}}$. Ce résultat sur l'acier 22NiMoCr37, renforce l'idée d'une entité microstructurale contrôlant le clivage qui évolue avec le développement de l'endommagement ductile. Ce mécanisme doit cependant être confirmé sur l'acier 16MND5 avant de pouvoir être généralisé.

Le rapprochement des sites d'amorçage du clivage du front de déchirure ductile, dès que les avancées

⁴³Pre-cracked Charpy V-Notch.

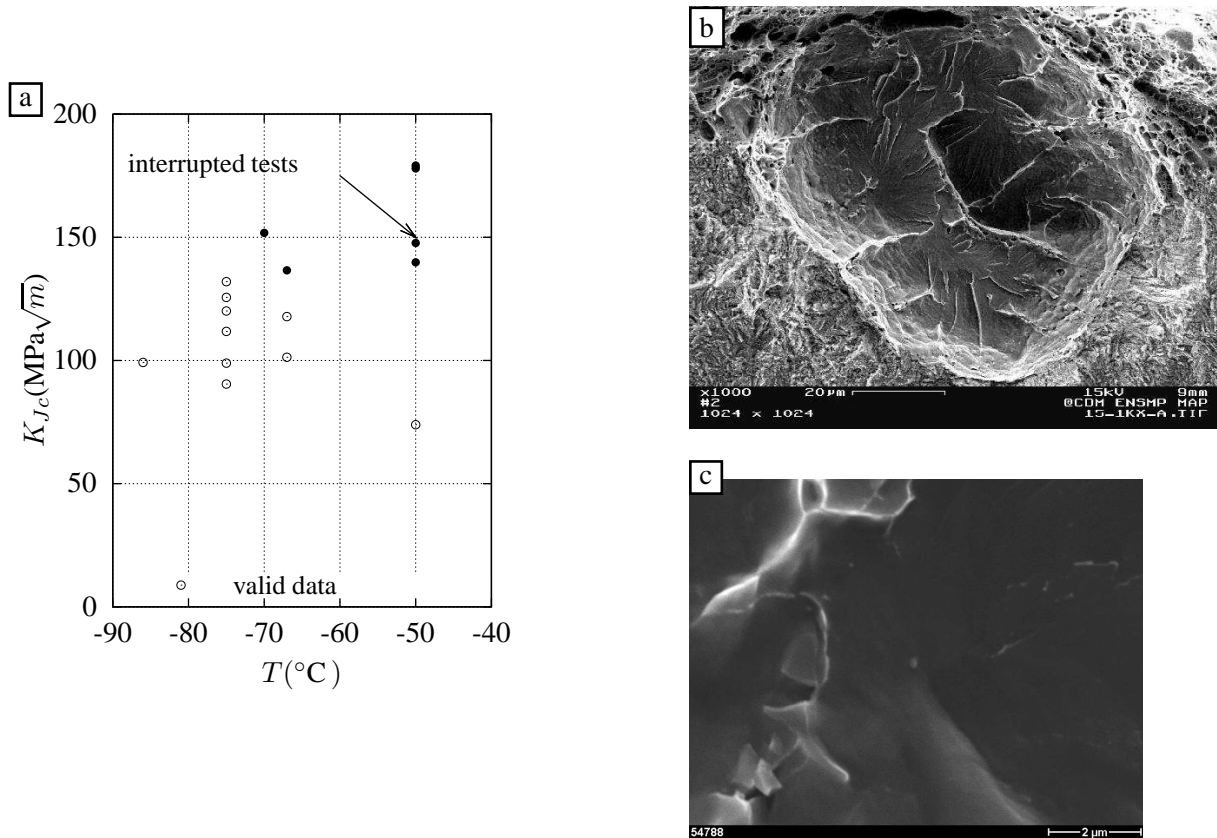


Figure 35: Essais de ténacité interrompus sur éprouvettes PCVN. Acier 22NiMoCr37. $T = -50^{\circ}\text{C}$, $K_{Jc} = 150 \text{MPa}\sqrt{\text{m}}$. a) Evolution de la ténacité avec la température, b) fissure de clivage arrêtée, proche du front de fissure de fatigue, c) carbure fissuré à l'amorçage du clivage dans la zone de clivage arrêté (Tanguy and Siegele, 2002; Tanguy et al., 2003b)*.

ductiles sont de l'ordre de $300\mu\text{m}$, conduit à s'interroger sur la pertinence des champs de contrainte obtenus par la modélisation dans la transition ductile-fragile. En effet, les volumes élémentaires représentatifs des deux mécanismes de rupture sont très différents. Dans nos travaux, une taille de maille effective de $75\mu\text{m}$ ⁴⁴ a été identifiée pour le mode de rupture ductile et est utilisée implicitement pour la prédiction du clivage. Cette incompatibilité apparente d'échelles peut être résolue par l'utilisation d'un modèle non local pour l'endommagement ductile (voir par ex. (Samal et al., 2008)) et d'un modèle de clivage avec une longueur interne comme proposé par (Kroon and Faleskog, 2002), en utilisant des valeurs de longueur interne différentes pour les deux mécanismes.

⁴⁴Taille de maille sur laquelle on moyenne les variables mécaniques.

V.4. Etude de l'influence de la fragilisation par l'irradiation sur les courbes de résilience et de ténacité

V.4.1. Introduction

Pour maîtriser l'intégrité des cuves de réacteurs à eau pressurisée (REP) pour des durées de fonctionnement de 40 ans et plus, les exploitants souhaitent anticiper la fragilisation par irradiation de l'acier de cuve, et notamment ses effets sur le décalage des courbes de transition en résilience et en ténacité. Le programme de surveillance (PSI) du parc français s'appuie sur une courbe en ténacité de référence (enveloppe basse déterministe) indexée sur une température de référence (RT_{NDT}^{45}) propre à chaque cuve et sur des corrélations semi-empiriques entre le décalage des courbes de résilience et le décalage de la température de référence en fonction de la fluence Φ , $\Delta RT_{NDT}(\Phi)^{46}$. Pour déterminer le décalage des courbes de résilience, l'index de température, T_{56J} , température pour laquelle l'énergie de résilience vaut 56 J est utilisé dans le PSI. La démarche utilisée est illustrée sur la figure 36. La base expérimentale constituée par le PSI consiste en partie en des valeurs du décalage de l'index de température ΔT_{56J} en fonction des différents niveaux d'irradiation. Grâce à des éprouvettes de surveillance placées plus près du coeur du réacteur nucléaire, le PSI permet aujourd'hui d'atteindre des valeurs de ΔT_{56J} pour des fluences jusqu'à une durée de fonctionnement de 40 ans. Au delà de 40 ans, les données expérimentales sont essentiellement issues de réacteurs expérimentaux, où les flux de neutrons rapides permettent en quelques années d'obtenir une fragilisation équivalente à 50 ou 60 ans d'exploitation. Actuellement, une démarche semi-empirique basée sur une relation entre les valeurs

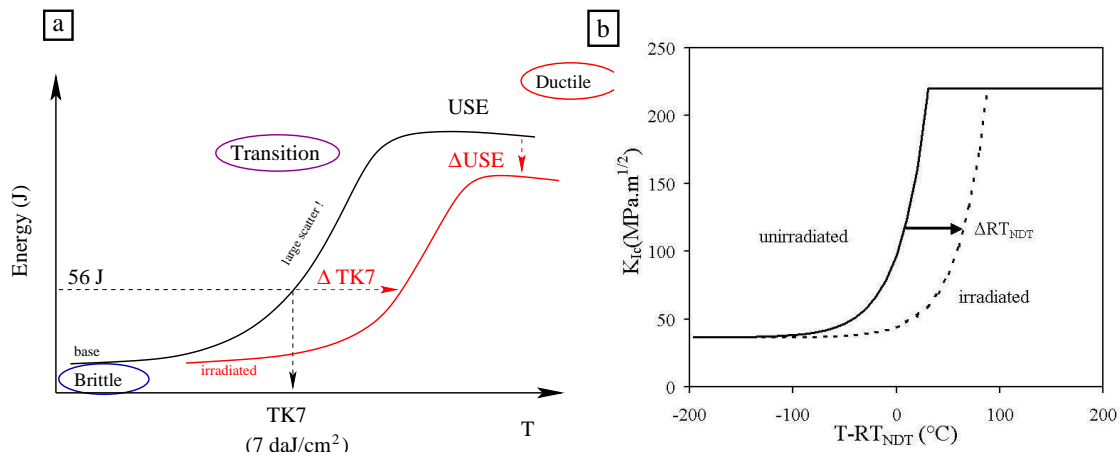


Figure 36: Illustration de la démarche utilisée pour la programme de surveillance des cuves de REP françaises pour évaluer les décalages de la courbe basse de référence de ténacité dus à la fragilisation par l'irradiation. a) décalage des courbes de résilience mesuré par l'index de température ΔT_{56J} ($\Delta TK7$), b) décalage de la courbe enveloppe basse de ténacité de $\Delta RT_{NDT} = \Delta T_{56J}$.

ΔT_{56J} , la composition chimique et la fluence est utilisée pour anticiper la fragilisation de la cuve. Elle

⁴⁵ RT_{NDT} : nil ductility reference temperature.

⁴⁶On fait l'hypothèse que le décalage de la courbe enveloppe basse de ténacité, $\Delta RT_{NDT}(\Phi)$, peut être évalué par le décalage de la courbe de résilience, ΔT_{56J} .

permet de définir la courbe enveloppe basse de la ténacité (approche globale déterministe) à chaque niveau de fluence, et ainsi de définir le chargement critique de la cuve pour une longueur donnée de défaut détecté. Parallèlement, une démarche de prévision du vieillissement des cuves et de leur intégrité est développée afin de pouvoir évaluer les marges de sécurité inhérentes à l'approche semi-empirique de référence. Elle repose sur l'utilisation d'une modélisation mécanique physiquement fondée, d'une part, sur les mécanismes de rupture rencontrés dans la gamme de température des courbes de transition et, d'autre part, sur les effets de la fragilisation par irradiation sur le comportement du matériau de la cuve. Nos travaux se situent dans le cadre de cette seconde démarche.

V.4.2. Démarche adoptée

L'étude de cette problématique a été initiée dans le travail de C. Bouchet. Elle utilise la méthodologie développée pour la modélisation de l'essai Charpy dans la transition ductile–fragile et introduit, à l'échelle du milieu homogène, les effets de l'irradiation sur le comportement mécanique, sur l'endommagement ductile et sur la rupture fragile. Le cas de l'acier 16MND5 est étudié, cependant la démarche utilisée permettrait une application à d'autres aciers de cuve. Le modèle de Rousselier modifié⁴⁷ (Tanguy and Besson, 2002)* et le modèle de Beremin modifié (relations. 27 à 27c) ont été utilisés pour modéliser la déchirure ductile et la rupture par clivage, respectivement. Cette démarche est illustrée dans l'article (Tanguy et al., 2006b)* reporté à la fin de cette partie.

L'irradiation neutronique de l'acier de cuve produit des dommages au niveau du réseau atomique qui se traduisent, à l'échelle cristalline, par une évolution de la microstructure (voir par ex. (Nikolaev et al., 2002)) par des mécanismes de durcissement et des mécanismes de modification locale de la résistance, telle la ségrégation d'éléments chimiques aux joints de grains et/ou aux interfaces particules/matrice. A l'échelle macroscopique, ces mécanismes se traduisent par une variation des propriétés mécaniques usuelles : augmentation de la résistance du matériau en traction avec l'augmentation de la fluence (fig. 37a) et pour la courbe de résilience, augmentation de la température de transition ductile–fragile (fig. 37b) et baisse⁴⁸ de l'énergie au plateau ductile (USE) (fig. 36a) avec l'augmentation de la fluence.

Dans le cadre de nos études, nous nous sommes intéressés à l'acier 16MND5 pour lequel les teneurs relativement faibles en cuivre et en phosphore limitent une implication importante de ces éléments dans les mécanismes de durcissement et de fragilisation dus à l'irradiation tel que la rupture fragile intergranulaire due à la ségrégation du phosphore aux joints de grains.

Dans un premier temps, seule la modification des propriétés de traction en fonction de la fluence a été introduite dans la modélisation. La figure 37c illustre de façon schématique la modification observée expérimentalement du comportement en traction par l'irradiation (courbe irr. 3) qui se traduit par une augmentation de la limite d'élasticité et une diminution du taux d'écrouissage, $\Delta\sigma/\Delta p$.

Les données expérimentales sur matériaux irradiés que l'on trouve dans la littérature sont essentiellement les variations de la limite d'élasticité ($\Delta\sigma_Y$) et de la température de transition ductile–fragile (ΔT_{56J}) avec la fluence. Dans le cadre de nos travaux, l'évolution de la contrainte ultime, R_m , pour un matériau de

⁴⁷Le modèle GTN a également été utilisé dans la plupart de nos études sur cette problématique, pour valider les résultats obtenus avec le modèle de Rousselier modifié.

⁴⁸L'importance relative de cette baisse est fortement dépendante du matériau considéré.

cuve donné, a été également obtenue auprès de l'exploitant. La comparaison par rapport à ces données expérimentales montre que la modélisation de la modification du comportement en traction par une simple translation verticale de la courbe de traction de $\Delta\sigma_Y(\Phi)$ du matériau non-irradié est en première approximation la plus appropriée pour représenter le durcissement dû à l'irradiation (courbe irr.1 de la figure 37c)⁴⁹

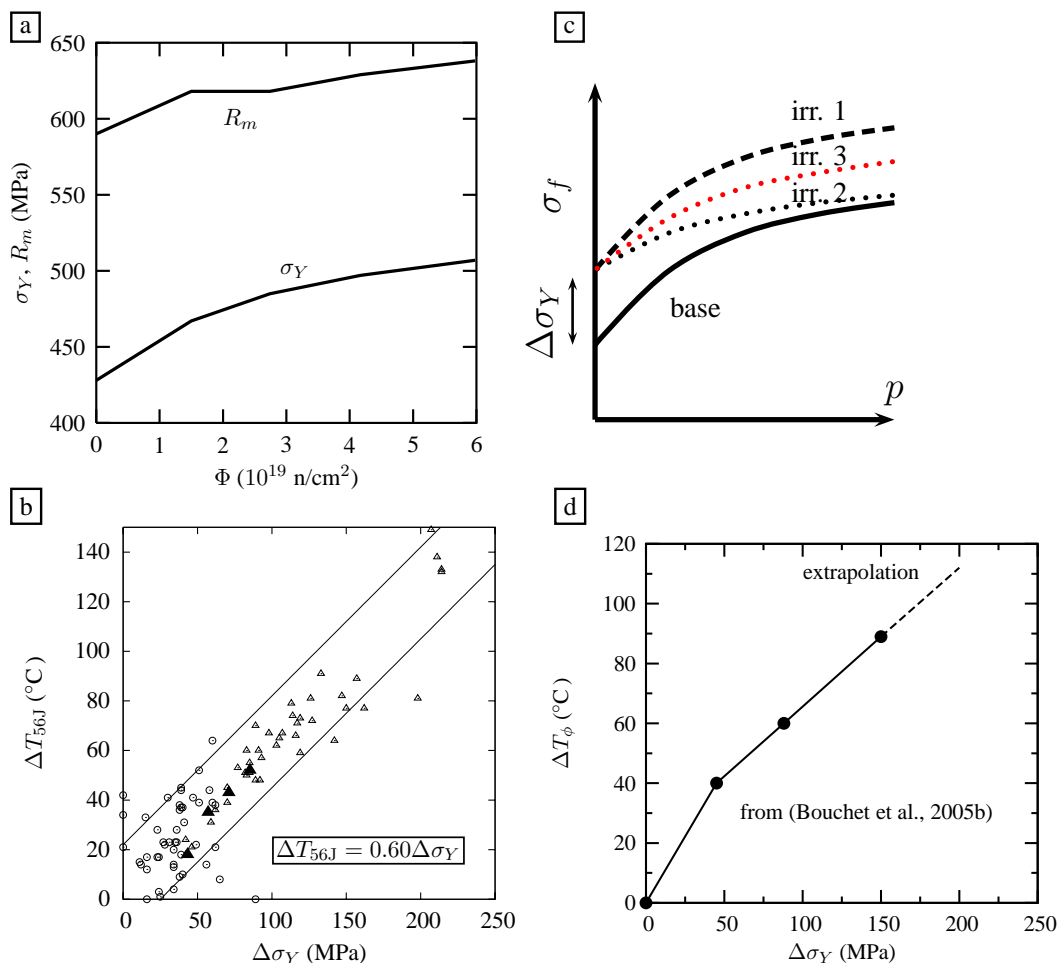


Figure 37: Effet de l'irradiation sur la modification des propriétés mécaniques usuelles de l'acier de cuve 16MND5. a) Variation de la limite d'élasticité ($R_{p0,2}$), notée ici σ_Y , et de la contrainte ultime (R_m) en fonction de la fluence, b) Variation de l'index ΔT_{56J} avec la variation de la limite d'élasticité pour plusieurs aciers de cuve, c) Représentation des différentes modélisations étudiées de la modification de la courbe de traction, d) Décalage en température, en fonction du niveau de fluence, du paramètre $\sigma_u(T)$ identifié à partir des essais Charpy (fig. 31a). (Bouchet et al., 2003; Bouchet et al., 2005b)*

⁴⁹L'accès à une base expérimentale plus riche, nous a permis depuis d'introduire une modélisation plus fine de la modification de la courbe de traction par l'irradiation et de l'utiliser pour la prévision des courbes de résilience de ténacité en fonction de différents niveaux de fluence (Tanguy, 2007)*.

V.4.3. Effet de l'irradiation sur le clivage

Dans cette partie, seule l'augmentation de la limite d'élasticité avec la fluence est introduite dans la modélisation de la courbe de résilience et de la courbe de ténacité. Pour chaque durcissement introduit, on évalue la fragilisation induite de la courbe de résilience ($\Delta T_{56,J}$) et ensuite de la courbe de ténacité ($\Delta T_{KIc,100}$) évaluée pour un niveau de $100 \text{ MPa} \cdot \sqrt{m}$.

En introduisant dans la modélisation trois valeurs de décalages $\Delta\sigma_Y(\Phi)=45, 88$ et 150 MPa , correspondant respectivement à des faibles, moyennes et fortes fluences, nous avons montré qu'afin de représenter les décalages $\Delta T_{56,J}$ observés sur la figure 37b, il fallait décaler horizontalement la courbe $\sigma_u(T)$ vers les hautes températures lorsque la fluence augmente, et introduire une dépendance avec le niveau de fluence du paramètre $\sigma_u^{irr} = \sigma_u(T + \Delta T_\Phi)$ dans le modèle de Beremin modifié (voir fig. 37d) (Bouchet et al., 2005b; Tanguy et al., 2006b)*.

Pour pouvoir prédire les décalages des courbes de ténacité, on détermine alors la dépendance $\sigma_u^{irr} = \sigma_u(T + \Delta T_\Phi)$ à partir de la modélisation des essais Charpy. La méthode proposée est donc d'interpréter les essais Charpy pour pouvoir prévoir la courbe de ténacité pour différents niveaux de fluence. La confrontation aux données expérimentales de ténacité sur matériau irradié a montré que cette méthode permet de prévoir la fragilisation par l'irradiation pour les différents niveaux de fluence considérés (Tanguy et al., 2006b)*.

Par ailleurs, une dépendance $\sigma_u^{irr}(T, \Phi)$ très proche de celle issue de nos travaux a été récemment obtenue à partir d'une méthodologie différente⁵⁰ (Parrot et al., 2006), ce qui conforte les résultats de notre approche.

Les valeurs des décalages des courbes de ténacité ($\Delta T_{KIc,100}^{num}$), calculées pour un niveau de $100 \text{ MPa} \cdot \sqrt{m}$ sont reportées dans le tableau 2 où elles sont comparées aux valeurs des décalages des courbes de résilience. Elles mettent en évidence que les décalages prévus des courbes de ténacité, $\Delta T_{KIc,100}^{num}$, peuvent être supérieurs à ceux des courbes de résilience, $\Delta T_{56,J}$, sous l'hypothèse considérée pour la description de l'écroissage. Ce résultat de la modélisation a été validé expérimentalement à partir des essais menés sur l'acier 16MND5 à l'état irradié. Il est particulièrement important dans l'exploitation du programme de surveillance, où l'on fait l'hypothèse que le décalage des courbes de résilience est identique à celui de la courbe enveloppe de ténacité.

| $\Delta\sigma_Y / \text{MPa}$ | $\Delta T_{56,J} / ^\circ\text{C}$ | $\Delta T_{KIc,100}^{num} / ^\circ\text{C}$ | $\Delta T_{KIc,100}^{analy} / ^\circ\text{C}$ |
|-------------------------------|------------------------------------|---|---|
| 45 | 30 | 49 | 31 |
| 88 | 56 | 73 | 60 |
| 150 | 95 | 104 | 103 |

Tableau 2: Comparaison entre les décalages $\Delta T_{56,J}$, $\Delta T_{KIc,100}^{num}$ prédits à partir de l'analyse numérique et ceux prédits à partir d'une formulation analytique, $\Delta T_{KIc,100}^{analy}$ (Tanguy et al., 2006b)*, (Pineau and Pardoën, 2007).

⁵⁰Dans l'étude citée, la dépendance $\sigma_u^{irr}(T, \Phi)$ vis-à-vis de la fluence est obtenue à partir d'essais de ténacité sur matériau irradié.

La méthodologie employée mettant en oeuvre une modélisation complète de l'essai Charpy et de l'essai de ténacité, il est intéressant pour l'ingénieur de voir si l'utilisation de modèles analytiques permettrait d'obtenir une estimation correcte des prévisions des décalages en ténacité avec la fluence. Cette démarche a été effectuée à partir d'une dérivation de l'équation 19 et en faisant l'hypothèse que l'irradiation n'affecte pas le taux d'érouissage (cas irr.1 sur la figure 37c). On obtient l'expression analytique (28) où l'augmentation de la limite d'élasticité $\Delta\sigma_Y$ est due à l'irradiation.

$$\frac{\Delta K_{Ic}}{K_{Ic}} = \left(\frac{m}{4} - 1\right) \frac{\Delta\sigma_Y}{\sigma_Y((m/4) - 1)} \quad (28)$$

A partir de la température de transition en ténacité pour une valeur de $100\text{MPa}\cdot\sqrt{m}$ à l'état non irradié et de la connaissance du durcissement des propriétés de traction, les valeurs analytiques $\Delta T_{K_{Ic},100}^{analy}$ ont été évaluées. Les valeurs obtenues pour les différentes valeurs de $\Delta\sigma_Y$ considérées dans cette étude, sont reportées dans le tableau (2). On obtient un accord satisfaisant entre l'approche analytique et numérique, particulièrement pour le décalage de la limite d'élasticité le plus important. Ce bon accord pour les forts niveaux de durcissement est expliqué par l'hypothèse de plasticité confinée relative à l'équation (28), qui est mieux vérifiée pour les forts niveaux de fragilisation.

L'outil numérique proposé met également en évidence que pour tous les niveaux de durcissement considérés, l'énergie de 56J utilisée dans le PSI correspond à un amorçage et à une propagation de la déchirure ductile entre 200 et $500\mu\text{m}$, la propagation ductile diminuant avec l'augmentation des durcissements. Cela signifie d'une part, que l'interprétation des essais de résilience sur matériaux irradiés nécessite de modéliser l'endommagement ductile et de prendre en compte les effets potentiels de l'irradiation sur les cinétiques de cet endommagement et, d'autre part, comme nous l'avons montré au chapitre IV. que les mécanismes du clivage seront affectés par l'endommagement ductile qui précède la rupture fragile. On notera que pour le niveau d'énergie utilisé dans le programme de surveillance américain, c'est-à-dire 41J, il n'y a pas d'amorçage ductile, ce qui facilitera l'interprétation des essais Charpy avec la méthodologie développée dans nos travaux.

Au contraire, on montre que pour le niveau de ténacité utilisé pour évaluer les décalages des courbes de ténacité, c'est-à-dire $100\text{MPa}\cdot\sqrt{m}$, la déchirure ductile n'est pas amorcée, et ce d'autant moins que le durcissement augmente. Cela signifie d'une part, qu'une modélisation sans prise en compte de l'endommagement ductile pourra être utilisée, et d'autre part que les mécanismes de clivage ne seront pas affectés par l'endommagement ductile, ce qui explique également le bon accord obtenu entre l'outil numérique et le modèle analytique donné par la relation (28)

V.4.4. Effet de l'irradiation sur la rupture ductile

A partir de la modélisation développée, nous avons montré que l'introduction de la seule dépendance de la courbe de traction avec la fluence ne permet pas de représenter la diminution de l'énergie au plateau ductile (USE) pour les forts niveaux d'irradiation⁵¹, pourtant observée dans beaucoup d'études expérimentales. On peut donc déduire de ce résultat qu'un ou plusieurs mécanismes physiques n'ont pas

⁵¹On observe parfois une augmentation de l'USE pour les faibles niveaux de fluence, puis une diminution de l'USE pour les fluences plus élevées.

été correctement représentés dans la modélisation proposée.

Des caractérisations fines de l'acier de cuve irradié sont très rares dans la littérature ouverte. Nous avons donc utilisé l'outil numérique⁵² pour analyser quel mécanisme pouvait montrer une dépendance à l'irradiation. Deux effets potentiels de l'irradiation non décrits dans la modélisation initiale ont été étudiés et sont décrits ci-dessous. Pour rendre compte de ces effets sur la rupture ductile de l'éprouvette Charpy, nous avons utilisé le paramètre numérique DFE (Ductile Fracture Energy), qui est l'énergie, issue de la modélisation, nécessaire pour rompre entièrement en mode ductile une éprouvette Charpy. Le paramètre numérique DFE, qui peut être évalué à toutes les températures, est égal à l'énergie USE (Upper Shelf Energy) lorsque la température d'essai conduit à un mode de rupture "réel" du matériau entièrement ductile.

- **La diminution du taux d'écroissage avec l'irradiation.**

Cet effet a été évalué dans une étude numérique paramétrique, en utilisant pour modéliser le comportement de l'acier de cuve irradié la courbe de traction schématisée par la courbe irr.2 sur la figure 37c. Dans ce cas, l'effet de l'irradiation sur les propriétés de traction est similaire à l'effet d'une prédéformation plastique du matériau. Cette modélisation extrême ne permet pas de rendre compte de la diminution du plateau haut de la courbe de résilience (Tanguy and Besson, 2005)*. La modélisation montre que, pour une température donnée, l'énergie DFE est toujours supérieure pour le matériau irradié à celle obtenue à l'état non irradié (fig. 38a). Si on considère maintenant l'énergie USE, elle est obtenue pour des températures supérieures à l'état irradié, car le matériau se fragilise, qu'à l'état non irradié : 0°C pour l'état non irradié, et 150°C à l'état irradié pour les résultats illustrés sur la figure 38a. Un rapport USE^{irr}/USE^{unirr} proche de l'unité est donc obtenu par la modélisation pour certains niveaux de fragilisation, cependant pour des niveaux de fragilisation correspondant aux données expérimentales, ce rapport n'est jamais inférieur à l'unité.

- **La modification des mécanismes de la rupture ductile.**

On considère ici, dans le cadre des mécanismes décrits dans le paragraphe III.2. au chapitre III., trois modifications possibles des cinétiques de l'endommagement ductile par l'irradiation : la croissance des cavités par la modification des propriétés mécaniques, la germination à partir de la seconde population⁵³, la coalescence menant à la rupture finale de l'élément de volume.

- *La croissance des cavités.* Cet effet a été étudié à partir de calculs sur une cellule élémentaire (Faleskog et al., 1998), en utilisant les lois de comportement identifiées à différentes fluences. Dans l'étude paramétrique illustrée sur la figure 38b, où l'on représente la porosité due à la croissance des cavités initialement présente dans le matériau en fonction de la déformation axiale, différents niveaux de triaxialité des contraintes (2, 2.5 et 3) et trois lois de comportement (non irradié, un matériau avec un durcissement de type irr.1, un matériau avec un durcissement de type irr.2.) ont été considérés. Nos résultats montrent que la croissance d'une cavité est d'autant plus accélérée que le taux d'écroissage est diminué

⁵²Les modèles d'endommagement ductile utilisés ici sont ceux décrits dans la première partie du mémoire.

⁵³Pour les aciers de cuve, la germination autour des inclusions type MnS est quasi-immédiate, limitant l'effet de l'irradiation sur ce mécanisme.

(type irr.2), ceci pour les trois valeurs de triaxialité considérée (fig. 38b) (Tanguy and Besson, 2005)*. La modification des propriétés mécaniques de la matrice par l'irradiation a donc un effet sur la croissance ductile. Cet effet a donc été intégré à notre modélisation en modifiant les paramètres q_1 et q_2 du modèle GTN avec la fluence.

Au niveau de l'essai Charpy, la compétition entre l'augmentation du paramètre DFE par le durcissement du comportement et sa diminution par l'accélération de la propagation ductile qui en résulte est illustrée sur la figure 38c. On a reporté sur cette figure, pour un acier 16MND5 du parc électronucléaire français, l'évolution du rapport DFE/DFE^{NI} (20°C) en fonction de la température pour l'état non-irradié et deux niveaux de fragilisation, 39 et 69 MPa, correspondants à deux niveaux de fluence. Les énergies USE pour chaque niveau d'irradiation sont indiquées par des symboles. Il est montré que pour un niveau de fragilisation de 69 MPa, le paramètre DFE est supérieur à celui calculé à l'état non-irradié mais inférieur à celui obtenu à 39 MPa, ce qui est dû à une accélération de la vitesse de propagation de la déchirure ductile pour ce niveau de fragilisation. Il est également montré sur la figure 38c que l'USE augmente pour le niveau de fragilisation le plus faible, puis diminue pour être égale au niveau obtenu à l'état non-irradié pour le niveau de fragilisation le plus important. Ce résultat est en partie dû au fait que l'énergie USE est toujours obtenue pour une température plus élevée à l'état irradié qu'à l'état non-irradié. Le rapport USE^{irr}/USE^{NI} est donc le résultat d'un effet de l'écroûissage et d'un effet de la température. Ce résultat a été validé par des données expérimentales (Tanguy, 2007)*. Cette modification de la cinétique de croissance dans la modélisation, qui est très faible dans le cas du matériau étudié, ne permet cependant pas d'obtenir une baisse marquée de la valeur de l'USE.

- *La germination sur la seconde population de particules.* Dans les aciers de cuve, la germination de nouvelles cavités se fait à partir de particules de seconde phase (carbures de fer). La modification par l'irradiation de la cinétique de germination autour des carbures est un mécanisme proposé sur des aciers de cuve irradiés des centrales électronucléaires des pays de l'Est (Margolin and Kostylev, 1999a; Nikolaev et al., 2002; Gurovich et al., 2000). Cette modification peut être due à la ségrégation des impuretés et au développement de la localisation de la micro-plasticité, dans la matrice au voisinage des interfaces matrice/carbure⁵⁴. Il en résulte une augmentation importante de la contrainte locale sur les carbures. Ce dernier phénomène ne peut être décrit à l'échelle de notre modélisation, sa modélisation doit s'appuyer sur la dynamique des dislocations. La modélisation du premier phénomène peut être traitée soit en modifiant la déformation critique de germination p_c^{nuc} , soit en modifiant le vitesse de germination (via le paramètre A_n , équation 9). A partir d'une étude paramétrique (Tanguy and Besson, 2005)*, nous avons montré que seule la modification de la déformation critique de germination permet de faire varier de façon conséquente le paramètre DFE et par conséquent l'énergie USE. La figure 38d illustre un cas extrême dans lequel la déformation critique de germination est nulle. On reporte sur cette figure, l'évolution de l'énergie CVN en fonction de la température pour une isoprobabilité

⁵⁴La ségrégation du phosphore est aussi un mécanisme envisagé pour les aciers avec une forte teneur en cet élément.

de rupture de 50% à l'état NI et de 10, 50 et 90% à l'état irradié. Les résultats à l'état irradié sont obtenus en considérant une forte diminution de la déformation critique de germination ($p_c^{nuc} = 0$) par rapport à l'état non-irradié ($p_c^{nuc} = 0.5$). Les énergies DFE à l'état irradié avec et sans cette modification du paramètre p_c^{nuc} sont également reportées sur cette figure. Avec cette modification, une diminution d'environ 50% de l'énergie au plateau ductile est obtenue, ce qui est observé sur certains aciers avec une teneur en phosphore élevée (Nikolaev et al., 2002). On montre également que, toute chose égale par ailleurs, la modification de la cinétique de germination va également décaler la courbe de résilience vers les hautes températures, ce qui est illustré en comparant les figures 38d et 38a.

La baisse du plateau ductile par une accélération du processus de germination autour de la deuxième population de particules est confirmé expérimentalement par les travaux de (Hippesley and Druce, 1983) sur le vieillissement thermique d'un acier haute résistance qui montrent que la baisse du plateau ductile observée après vieillissement thermique est due à une accélération de la cinétique de germination autour de la seconde population de particules (carbures) qui résulte d'une ségrégation du phosphore aux interfaces carbures/matrice. Cette ségrégation du phosphore qui réduit la cohésion de l'interface particule/matrice se traduit macroscopiquement par une forte diminution de la déformation critique de germination en accord avec l'hypothèse retenue pour notre modélisation. Par ailleurs, les travaux de (Gurovich et al., 1997) sur un acier de cuve russe montrent que la baisse du plateau ductile observée expérimentalement n'est pas due à la fragilisation intergranulaire induite par la ségrégation du phosphore mais à la fragilisation intragranulaire aux interfaces carbures/matrice.

- *La coalescence.* Pour les fortes fluences, les dislocations ont tendance à s'organiser en canaux et à favoriser le développement de la localisation de la déformation plastique. Comme discuté précédemment cet effet ne peut être décrit à l'échelle de notre modélisation. Ce mécanisme peut être décrit indirectement par son effet sur la coalescence des cavités ductiles. Un exemple de la localisation qui intervient entre une fissure et une cavité en avant de celle-ci est donné sur la figure 16 de la référence (Tanguy et al., 2005b)* reportée à la fin de cette partie. Dans le cadre de notre modélisation, le processus de coalescence est décrit de façon phénoménologique et est géré par deux paramètres, f_c et δ ; le premier décrit la fraction volumique critique de cavités à partir de laquelle le processus de coalescence s'amorce, le deuxième décrit l'accélération de la croissance des cavités qui résulte de ce processus. L'effet de la variation de chaque paramètre, l'autre étant fixé à sa valeur initiale, sur la valeur de l'énergie au plateau ductile USE, est reporté sur la figure 39, où le ratio de l'énergie USE pour une fluence équivalente à 40 ans de durée de fonctionnement sur l'énergie à l'état non irradié est donné. On montre sur cette figure que l'accélération de la coalescence ou la diminution de la fraction critique de cavité ont un effet similaire et permettent de diminuer la valeur de l'USE afin de représenter la valeur expérimentale pour une irradiation équivalente à 40 ans de durée de fonctionnement. Il n'est cependant pas possible de discriminer le mécanisme prépondérant avec la modélisation proposée.

Les analyses réalisées montrent que l'introduction d'une dépendance des mécanismes de germination

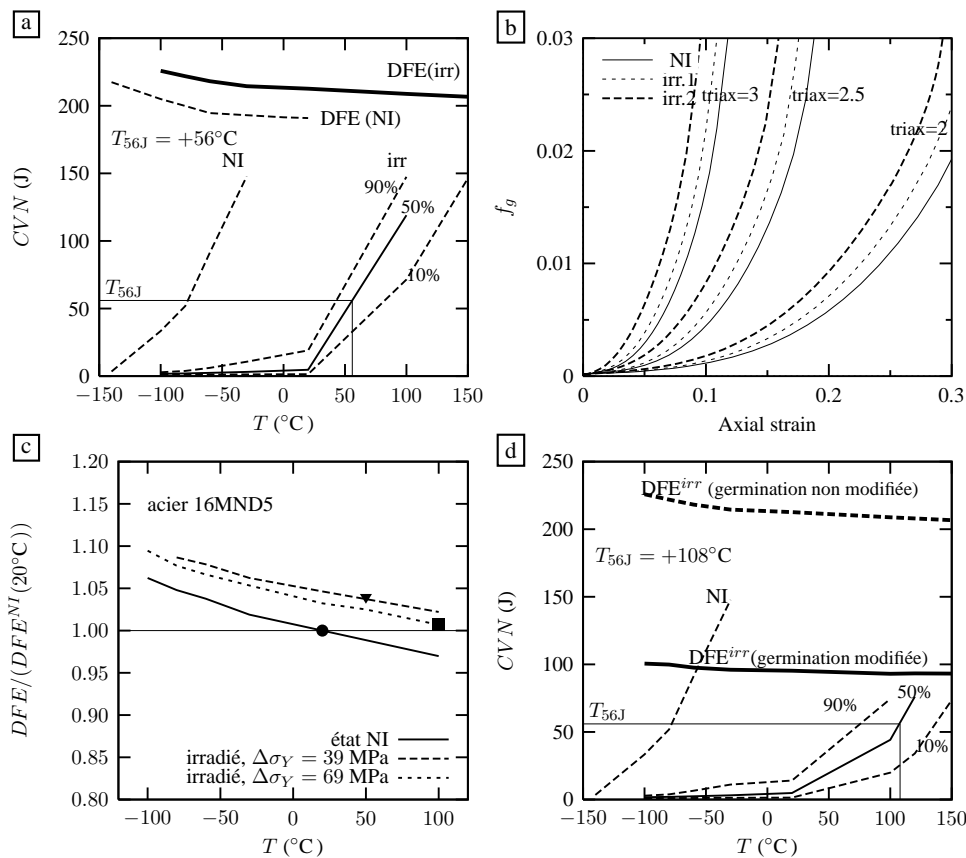


Figure 38: *Etude de l'effet de l'irradiation sur la déchirure ductile. a) Etude paramétrique. Décalage des courbes de résilience et augmentation de l'énergie pour la rupture en mode ductile (DFE) entre l'état non irradié (NI) et irradié (irr) pour un niveau de fragilisation de 200MPa. A l'état NI, les énergies correspondantes à une probabilité de rupture de 50% sont indiquées, à l'état irradié, les énergies correspondantes à des probabilités de rupture de 10, 50 et 90% sont indiquées (Tanguy and Besson, 2005)*, b) Etude paramétrique sur cellule élémentaire. Effet de la modélisation de la modification de la courbe de traction par l'irradiation (irr1 ou irr2) sur la cinétique de croissance d'une cavité pour différents niveaux de triaxialité (Tanguy and Besson, 2005)*, c) Acier 16MND5 du parc nucléaire français. Illustration de la compétition entre le durcissement par l'irradiation et l'accélération de la déchirure ductile sur l'énergie pour la rupture en mode ductile (DFE) pour deux niveaux de fragilisation $\Delta\sigma_Y$ (Tanguy et al., 2006a)*, d) Etude paramétrique. Illustration de la baisse de l'énergie de rupture en mode ductile induite par une accélération de la cinétique de germination. Cas de la figure a) avec $p_c^{nuc} = 0$ (Tanguy and Besson, 2005)*.*

et de coalescence vis-à-vis de l'irradiation permettent de rendre compte de la diminution de l'énergie au plateau ductile avec l'augmentation de la fluence. Elles ne permettent cependant pas de discriminer *a-priori* le mécanisme prépondérant, et l'on doit à nouveau s'appuyer sur les données expérimentales : l'augmentation de la fraction surfacique des lèvres de cisaillement avec l'irradiation observée, sur un acier de cuve au Vanadium (Hausild et al., 2005), semble indiquer la modification de la cinétique de germination par l'irradiation. En effet, les observations que nous avons réalisées sur l'acier 16MND5 à l'état non-irradié et sur l'acier X100 montrent que la germination à partir de la seconde population de

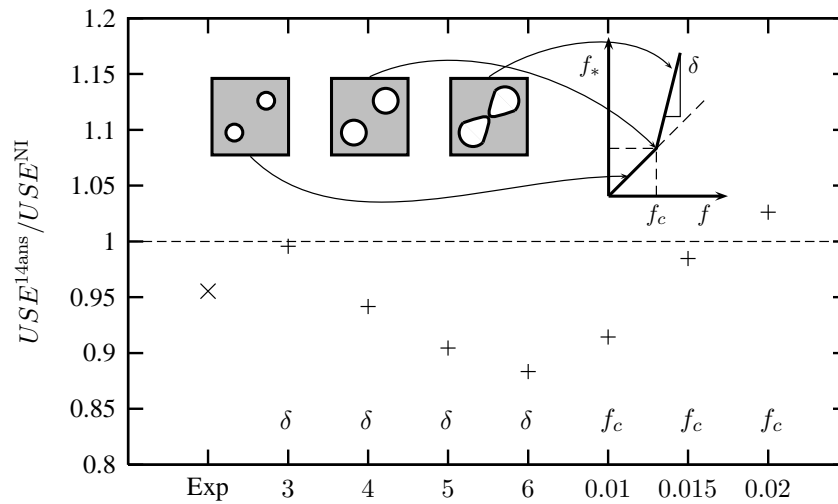
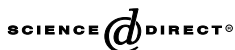


Figure 39: Effet de la modification de la cinétique de coalescence sur la diminution de l'énergie au plateau ductile. USE^{14ans} : énergie au plateau ductile pour une durée de vie équivalente à 40ans, USE^{NI} : énergie au plateau ductile à l'état non irradié. Paramètres initiaux ($f_c = 0.023$, $\delta = 2.5$).

particules est le mécanisme prépondérant dans la rupture en biseau. Par ailleurs cette étude montre également que la vitesse de propagation de la déchirure ductile n'est pas modifiée par l'irradiation, contrairement à ce que décrit notre modélisation si seule une modification de la cinétique de coalescence est prise en compte. Enfin la modélisation montre qu'une accélération de la cinétique de germination conduit à une diminution de la pente de la courbe de résilience dans la transition ductile-fragile, en accord avec les observations expérimentales que nous avons réalisées sur un acier de cuve irradié à différents niveaux de fluence.

L'origine de la modification de la germination n'est cependant pas établie expérimentalement et devra s'appuyer sur des observations fines sur matériau irradié, par exemple avec une sonde Auger (Hippesley and Druce, 1983; Druce, 1986) ou une sonde atomique (Miller and Burke, 1992; Auger et al., 2000) pour quantifier la ségrégation aux interfaces particules/matrice. Pour les aciers de cuve avec une teneur importante en impuretés, cette modification est attribuée à la diminution de la résistance aux interfaces carbures/matrice par la ségrégation du phosphore (Margolin and Kostylev, 1999b; Gurovich et al., 2000; Nikolaev et al., 2002). Le rôle de la ségrégation du phosphore aux interfaces carbures/matrice dans l'accélération du processus de germination autour des carbures a également été observé après vieillissement thermique pour un acier avec une teneur en phosphore semblable à celle de l'acier 16MND5 (Hippesley and Druce, 1983).

Pour l'acier 16MND5 utilisé sur les cuves de REP de la deuxième génération, à notre connaissance ce mécanisme n'a jamais été envisagé, compte tenu des teneurs en phosphore relativement faible, même si localement ces teneurs peuvent augmenter sensiblement, et des températures d'utilisation qui compte tenu des durées de fonctionnement envisagées, ne devrait pas conduire à une fragilisation par vieillissement thermique. Pour cet acier, il semble plus probable que le mécanisme de localisation de la microplasticité dû à la microstructure d'irradiation soit une des explications possibles, celle-ci restant à explorer sur matériau irradié par des techniques telle que la microscopie électronique en transmission haute résolution. Le mécanisme de localisation de la microplasticité permettrait également d'expliquer la dépendance du paramètre σ_u vis-à-vis de l'irradiation et ainsi d'expliquer par un seul phénomène les effets de l'irradiation sur le clivage et sur l'endommagement ductile.

Available online at www.sciencedirect.com

Engineering Fracture Mechanics 72 (2005) 49–72

**Engineering
Fracture
Mechanics**www.elsevier.com/locate/engfracmech

Ductile to brittle transition of an A508 steel characterized by Charpy impact test Part I: experimental results

B. Tanguy ^{*}, J. Besson, R. Piques, A. Pineau*Ecole des Mines de Paris, Centre des Matériaux, UMR CNRS 7633 BP 87, 91003 Evry Cedex, France*

Received 11 August 2003; received in revised form 2 March 2004; accepted 23 March 2004

Abstract

This study is devoted to the ductile–brittle transition behavior of a French A508 C13 (16MND5) steel. Due to its importance for the safety assessment of PWR vessels, a full characterization of this steel with Charpy V-notch test in this range of temperature was undertaken. The aim of this study is to provide a wide experimental database and microstructural observations to supply, calibrate and validate models used in a local approach methodology. Mechanical and fracture properties of the steel have been investigated over a wide range of temperatures and strain-rates. Effects of impact velocity on ductile–brittle transition curve, on ductile tearing and on notch temperature rise are presented and discussed. A detailed study of ductile crack initiation and growth in Charpy specimens is also carried out. From fractographic investigations of the microvoids nucleation around carbide second phase particles, a plastic strain threshold for nucleation is determined for this material. A508 C13 steels undergo a transition in fracture toughness properties with temperature, due to a change in fracture mode from microvoids coalescence to cleavage fracture. A systematic investigation on the nature and the position of cleavage triggering sites and on any change in the ductile to brittle transition (DBT) range has been carried out. This leads to the conclusion that manganese sulfide inclusions do not play an increasing role with increasing test temperature as recently mentioned in other studies on A508 C13 steel with a higher sulfur content. In a companion paper [Tanguy et al., *Engng. Fract. Mech.*, in press], the numerical simulation of the Charpy test in the ductile–brittle transition range using fully coupled local approach to fracture is presented.

© 2004 Elsevier Ltd. All rights reserved.

Keywords: Ductile to brittle transition; Charpy test; Local approach; Ductile damage; Cleavage triggering sites

1. Introduction

In spite of its importance in structural integrity assessment, the evaluation of embrittlement of pressurized water reactors (PWR) has been based, for historical reasons, on qualitative notch–impact tests for

^{*} Corresponding author. Tel.: +33-1-60-76-30-61; fax: +33-1-60-76-31-50.

E-mail addresses: btanguy@mat.ensmp.fr, benoit.tanguy@ensmp.fr (B. Tanguy).

several decades. However toughness values are required to assess the structural integrity. The determination of the behavior of ferritic structural and pressure vessel steels through the transition temperature range is an important issue in consideration of safety cases for the safe operation.

For a more precise assessment, a better understanding of the Charpy test and of micromechanisms involved in fracture is needed. This is the first step to establish a non-empirical micromechanically based relationship between the Charpy impact energy (CVN) and the fracture toughness in the ductile–brittle transition. This research field has already been the topic of a number of studies. Among these studies many were devoted to nuclear pressure steels such as the A533B steel in the US [2–5], the 22NiMoCr3-7 steel in Germany [6–9] and the A508 C13 (16MND5) steel in France [10–16].

Although these materials are very similar, different mechanisms have been proposed as controlling the ductile–brittle transition behavior depending on the applied heat-treatments and chemical composition. Regarding cleavage, different triggering sites have been identified: iron based carbides or carbides colonies [17–19], small round manganese sulfides (MnS) inclusions [18,20], grain boundaries [21], TiC particles [17,18]. Even in the case of the French A508 steel for which the heat treatment is the same, recent studies have proposed different controlling mechanisms. For instance, MnS clusters have been identified to be at the origin of cleavage fracture in a steel containing a sulfur content of 0.008% (wt) [11,22,23]. However the role of these MnS clusters as stress concentrators has been questioned in a recent study devoted to the same material [24]. Recent metallurgical improvements have led to significant decrease in sulfur content which can be as low as 0.002–0.004 wt.%. Several western PWR vessels in duty are made of steel with such a low sulfur content [9,25]. A better understanding of the ductile to brittle transition (DBT) is still needed.

In parallel with these studies devoted to the improvement of materials for pressure vessels there is now a growing research interest to develop appropriate models based on the study of the micromechanisms of fracture and more often on finite element simulations. This is the so-called methodology of the local approach to fracture. These models apply to either ductile tearing or cleavage fracture [26–28]. Each model has shown good capacity of prediction as long as only one mechanism is involved. However, few studies [4,6,7,12,15,16,22,23,29] have been devoted to the complete description of DBT range including the sharp upturn, i.e. when cleavage is preceded by significant ductile crack growth. To fit and validate the models, a well established experimental database is needed.

This paper deals with the DBT behavior of a low sulfur A508 C13 steel representative of currently operating French PWR. It is devoted to a better understanding of:

- (i) the mechanical behavior of this steel over wide temperature and strain-rate ranges,
- (ii) the microscopic failure processes involved in the DBT range,
- (iii) the Charpy test itself.

These test data and microstructural observations are used in a companion paper [1] to develop and validate a model able to represent the whole Charpy transition curve from very low temperature to the upper shelf energy.

This paper first presents the material microstructure and its viscoplastic behavior. Rupture is then studied using notched round bars. An extensive study of the Charpy test is then presented where (i) the effect of impact velocity and (ii) the initiation and propagation of ductile damage and (iii) the nature and position of cleavage triggering sites are described.

2. Material

The material used in this study is an A508 C13 (16MND5) steel used for the fabrication of PWR vessels and manufactured by Framatome. Table 1 gives its chemical composition. It was heat treated (two

Table 1
Chemical composition of A508 Cl3 steel (wt.%)

| C | S | P | Si | Mn | Ni | Cr | Mo | Cu | Co | V |
|------|-------|-------|------|------|------|------|------|------|-------|--------|
| 0.16 | 0.004 | 0.008 | 0.22 | 1.33 | 0.76 | 0.22 | 0.51 | 0.07 | 0.017 | ≤ 0.01 |

austenitizing treatments followed by water quenching and tempering, and a final stress relief treatment) to obtain a tempered bainitic microstructure with a room temperature yield strength $\sigma_Y = 490$ MPa and an ultimate tensile strength, $\sigma_{UTS} = 620$ MPa. The typical microstructure is shown in Fig. 1. The prior

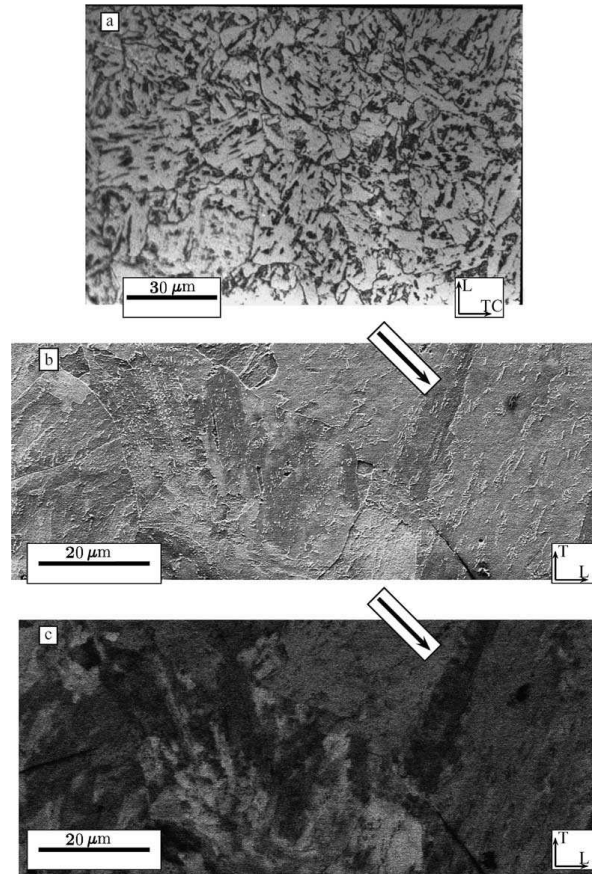


Fig. 1. Microstructure of A508 (16MND5) steel. (a) Optical micrograph (Nital 2% etched), (b) and (c) SEM micrograph (electrolytically etched) ((b) secondary electron and (c) back scattered electron). A bainitic packet is indicated by an arrow.

austenite grain size is between 20 and 30 μm and the mean diameter of bainitic packets is about 8 μm [12]. In the following, the metallurgical directions will be referred to as: L, T and S for the longitudinal (tangential direction in a shell), transverse (axial direction in a shell) and short transverse (radial) directions, respectively.

In such steels, inclusions play an important role as they are potential initiation fracture sites for both ductile and brittle fracture. The nature of these inclusions was investigated in previous studies [26,30]. They mainly consist of manganese sulfide (MnS), titanium carbides (TiC) and iron carbides (Fe_3C). MnS and Fe_3C particles play a key role for both brittle and ductile fracture whereas TiC are mostly involved in brittle failure but plays a minor role in A508 steels. The relative importance on the fracture mechanisms of MnS and Fe_3C particles varies from one heat to another one. In the case of MnS inclusions, their shape and the volume fraction are well known to be the most important factors controlling ductile fracture. For brittle fracture, less information is available in the literature. In the case of Fe_3C precipitates, heat treatment controls their embrittling effect and therefore affects both ductile and brittle fracture [31,32].

The present steel has a low sulfur content (0.004 wt.%) which is representative of recent PWR vessels. In particular the sulfur content is lower than in similar steels investigated in previous studies [11,16,22,23] for which the content is equal to 0.008 wt.%. An obvious consequence is the increase of the MnS volume fraction. In addition this larger amount in sulfur content also presumably leads to MnS clustering as shown in [22,23]. In this study the MnS volume fraction was evaluated to 1.75×10^{-4} using both the Franklin formula [33] and image analysis, a good agreement being found between both methods [12]. The mean distance between inclusions in a plane normal to crack front was evaluated to be around 160 μm [12].

3. Viscoplastic behavior of the material in the transition range

3.1. Experiments

Two types of specimens were manufactured: round tensile (RT) specimens (6.18 mm diameter and 44.5 mm gauge length) with their gauge length parallel to the long transverse (T) orientation; cylindrical compressive specimens (diameter 7 mm and height 8 mm). Tensile specimens were loaded with an Instron servohydraulic machine at a ram displacement rate of 1.07 mm/min (mean strain-rate of $4 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$), and at temperatures between -196 and 300 °C. Compressive specimens were loaded using a split Hopkinson bars. Care was taken to obtain a nearly constant strain-rate during the test. Strain-rates over the range (1×10^3 – $4 \times 10^3 \text{ s}^{-1}$) were explored in the temperature range (-100 °C, 300 °C) by this way. A comparison between quasi-static tensile and compressive tests was also made at ambient temperature to check the absence of any significant strength differential effect. The absence of this effect was also assumed under dynamic conditions.

3.2. Results

Full analysis of the viscoplastic behavior of the material was reported elsewhere [34]. Here the temperature dependence of the yield stress at different strain-rates (see Fig. 2) is only reported. It is underlined that, as reported in [34], the strain-rate sensitivity of the yield stress exhibits two regimes. More details are given in the companion paper [1]. These two regimes were also evidenced in a mild steel. The physical background of these regimes is explained in [35]. As both temperature effect and strain-rates sensitivity have to be considered to obtain an accurate simulation of the Charpy test, constitutive equations were developed to represent the observed yield stress dependences [34] and are given in the companion paper [1].

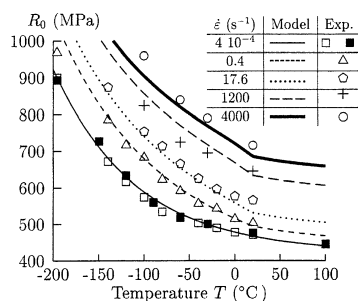


Fig. 2. Yield stress versus temperature at different strain-rates for A508 steel. Comparison between model and experiments.

4. Notched fracture behavior

4.1. Experiments

Axisymmetric notched tensile (NT) specimens were tested. These specimens are defined by the ratio ρ/Φ_0 where ρ is the radius of the notch and Φ_0 the minimum diameter. In order to obtain different stress states (quantified by the stress triaxiality ratio) in NT specimens, several notch geometries were used. The minimum diameter, Φ_0 , is equal to 6 mm; the maximum diameter is 10.8 mm and the notch radius ρ is such that $2\rho/\Phi_0 = 0.4, 0.8$ and 2 corresponding approximately to a mean stress triaxiality ratio of 1.4, 1.1 and 0.8, respectively [36].

NT specimens were tested over the temperature range (-196 °C, 20 °C) at a cross-head speed calculated to obtain a strain-rate of about 5×10^{-4} s⁻¹ in the minimum cross-section. The “effective” gauge length considered, parallel to the long transverse (T) orientation, was equal to two times the radius curvature ρ . The specimens were instrumented with a diametral extensometer. In order to identify parameters to describe ductile damage by the local approach to fracture (see Part II), strain controlled tests with a constant radial strain-rate were also carried out at ambient temperature [12]. Control of the radial strain-rate during the test allows us to obtain a whole description of the load–diameter reduction curve up to full failure, including the part of the curve after the sharp drop of the load (see Fig. 3d) which cannot be obtained with constant ram displacement rate test in particular in the sharply notched geometry [37]. In the case of ductile failure, the sharp load drop corresponds to crack initiation at the center of the specimen [38]. Description of the whole curve is however important to calibrate the models developed in Part II.

The minimum diameter variation $\Delta\Phi$ was continuously recorded during the tests. Typical normalised $F/S_0 - \Delta\Phi/\Phi_0$ curves are shown in Fig. 3d (S_0 : initial minimum cross-section). The mean fracture strain was calculated as:

$$\bar{\epsilon}_r = 2 \ln \frac{\Phi_0}{\Phi_r} \quad (1)$$

where Φ_0 and Φ_r are the initial and fracture minimum diameters, respectively. The mean fracture stress was obtained by:

$$\bar{\sigma}_r = \frac{4 \times F_r}{\pi \Phi_r^2} \quad (2)$$

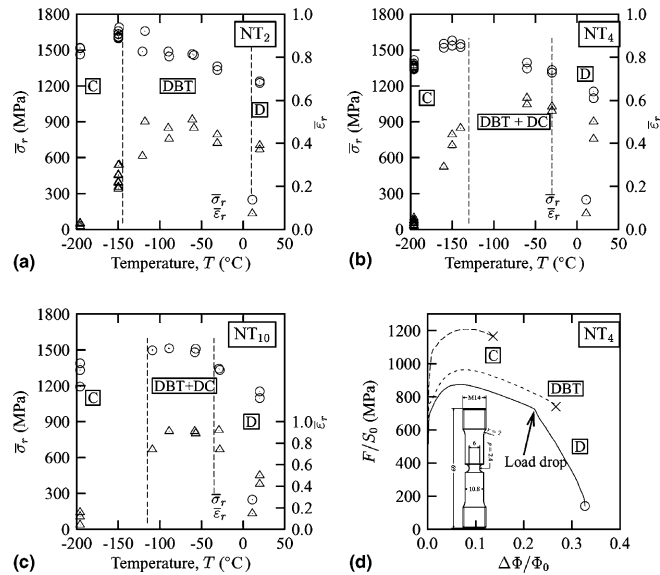


Fig. 3. Evolution of the mean fracture strains and stresses with temperature for notched specimens NT ((a)–(c)). Fracture mechanisms are indicated in each figure; C: cleavage with few ductile cavities; DBT: ductile–brittle transition; DC: presence of delaminated cleavage; D: ductile tearing. (d) Examples of load–diameter reduction curves obtained with NT₄ specimen geometry. Fracture mechanisms are indicated on each curve. The cross symbol corresponds to the unstable fracture of the specimen. The round symbol corresponds to an interrupted test.

where F_r is the load at fracture. In the case of the initiation of a ductile macrocrack at the center of the notch, failure (i.e. F_r and Φ_r) is defined at ductile crack initiation, i.e. at the onset of the sharp load drop (Fig. 3d).

4.2. Results

The variations of the mean fracture strains and stresses as a function of the test temperature for the three different notch radii are reported in Fig. 3a–c. The fracture mechanisms associated with each range of temperature are also indicated in these figures. As the notched specimens are used to determine the parameters needed in the models for both brittle and ductile fracture (see part II [1]), each fracture surface has been observed with SEM and classified in three main failure mode categories: brittle, ductile–brittle and fully ductile. The ductile–brittle surfaces correspond to the beginning of stable ductile tearing which was followed by unstable fracture by cleavage.

It is observed that as the notch radius increases, the temperature below which cleavage fracture is the prevailing mechanism increases and the temperature above which ductile fracture is the only mechanism decreases. When the fracture mode is fully ductile, a decrease of the test temperature increases the ductility of the material rendering the temperature stabilizing effect [39], due to a higher viscosity of the material at low temperature. Between -150 and 20 °C, the mean failure stress is continuously decreasing whereas it

slightly increases between -196 and -150 °C. All the results obtained at temperatures below than -150 °C were used to calibrate the brittle fracture model [1].

Observations of the NT fracture surfaces in the ductile–brittle transition showed that ductile fracture develops firstly as several ductile islands mainly located near the center of the specimen and then link together to create larger ductile damage zones. Ductile damage was observed to develop firstly around manganese sulfide (MnS) inclusions or clusters when such microstructural entities were found.

The role of the MnS inclusions as weak spots of cavities nucleation and growth was already observed in similar materials [30,37] but with higher sulfur content. The mean fracture strain is strongly dependent on the presence of such entities leading to a statistical aspect of the ductile fracture which was described in [40]. The effect of stress triaxiality ratio on the mean strain to failure (at failure initiation) is shown in Fig. 3: at room temperature the mean strain to failure is a decreasing function of the stress triaxiality ratio, as already reported for a similar steel [37,41].

5. Charpy tests

5.1. Experiments

Standard Charpy V-notch specimens (with a (10×10) mm² section, a central 45° V-notch of 2 mm depth and a 0.25 mm notch root radius) with their notch plane perpendicular to the long transverse orientation (T) and crack growth direction parallel to the longitudinal orientation of the shell (L) were tested in accordance with the French standard for impact testing of Charpy specimens (NF EN 10045–1) using an instrumented 300 J capacity impact tester, at temperatures over the range -165 to 100 °C. Interrupted Charpy impact tests (low blow tests) were also carried out at two temperatures ($T = -60$ and 20 °C) in order to investigate ductile crack growth well before cleavage fracture as a function of impact energy. These interrupted tests were performed by imposing an initial impact energy lower than the maximum energy of 300 Joules. In addition to these impact tests at high velocity (~ 5 m s⁻¹), three point-bend experiments were carried out on a 250 kN Instron servohydraulic machine at prescribed cross-head velocities of 1 μm s⁻¹ and 500 μm s⁻¹ over the temperature range -196 to 25 °C. A special set-up was machined to have the same contact conditions (hammer and anvils) as those for a conventional Charpy impact test. The number of specimens tested at each temperature for each velocity is given in Table 2.

Several interrupted impact tests were also carried out to estimate the increase of temperature due to plastic deformation at high strain-rate ahead of the notch. These measurements were made at room temperature and -60 °C by welding a tiny thermocouple ($\phi = 0.1$ mm) very close (~ 0.1 mm) to the notch tip on the lateral faces of Charpy specimens (see Fig. 6a).

5.2. Effect of impact velocity

5.2.1. Ductile–brittle transition

Experimental CVN energies for the three velocities are reported in Fig. 4. The CVN energies as a function of test temperature obtained at each velocity were fitted with an hyperbolic tangent function as proposed by Oldfield [42]. Parameters A , B , C , T_0 of Eq. (3)

$$\text{CVN} = A + B \tanh((T - T_0)/C) \quad (3)$$

are given in Table 3. TK_7 defined as the temperature for which the CVN energy is 56 J (70 J/cm²) is also reported as this temperature is currently used for the inservice evaluation of French PWR vessel steel. This temperature, as the ductile brittle transition temperature (DBTT), is often used to characterize the brittleness of a material.

Table 2
Number of specimens tested for each temperature and velocity

| T (°C) | $v_0 = 5 \text{ m s}^{-1}$ | $v_0 = 500 \text{ m s}^{-1}$ | $v_0 = 1 \text{ } \mu\text{m s}^{-1}$ |
|----------|----------------------------|------------------------------|---------------------------------------|
| -196 | | 1 | 1 |
| -165 | 1 | 1 | |
| -140 | | 1 | 1 |
| -120 | 2 | 1 | 2 |
| -100 | 4 | 1 | 3 |
| -90 | 4 | | |
| -80 | 7 | 5 | 6 |
| -60 | 11 | 3 | 6 |
| -45 | 7 | 3 | 4 |
| -30 | 4 | | |
| -20 | 3 | 3 | 2 |
| 0 | 3 | | 1 |
| RT | 2 | 2 | 1 |
| 100 | 2 | | |
| Total | 50 | 21 | 27 |

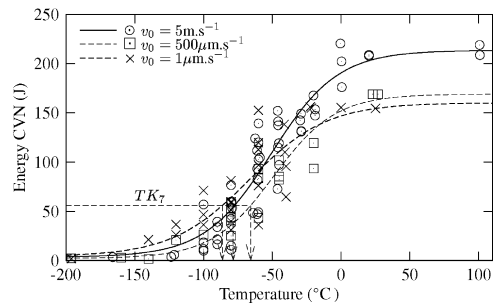


Fig. 4. Charpy V-notch (CVN) fracture toughness transition curves of 16MND5 (A508) for T-L Charpy specimens tested at different loading rates.

Table 3
Parameters of the CVN energy fitting function and index TK_7 for different test velocities

| v_0 | A | B | T_0 (°C) | C | TK_7 (°C) |
|-----------------------------------|-------|------|------------|------|-------------|
| 5 m s^{-1} | 108.5 | 105 | -50.8 | 48.4 | -78.4 |
| $500 \text{ } \mu\text{m s}^{-1}$ | 85.6 | 83.4 | -49 | 45 | -65.7 |
| $1 \text{ } \mu\text{m s}^{-1}$ | 82.2 | 78 | -66.6 | 56.3 | -86.3 |

The first main effect of impact velocity on CVN energy is observed on the upper shelf energy which is an increasing function of impact rate. The upper shelf decreases from about 220 J to 155 J when impact velocity decreases from 5 m s^{-1} to $1 \text{ } \mu\text{m s}^{-1}$. This behavior is mainly related to the increase of flow stress with strain-rate: higher test velocity leads to a higher maximum load, the deflexion at fracture being the

same when the behavior is fully ductile, the amount of energy is more important. This results in a higher upper shelf level.

As shown by the values of TK_7 the ductile–brittle transition temperature is not largely affected by impact velocity, contrarily to the situation usually observed in low strength ferritic steels, but similarly to what happens in a number of high strength steels [43]. If only the index TK_7 for 1 and $500 \mu\text{m s}^{-1}$ are considered, a positive temperature shift of $20.6 \text{ }^\circ\text{C}$ is obtained, higher TK_7 value resulting from higher velocity, leading to the usually observed weakening effect of the velocity on the DBTT index. Considering now the results obtained at $500 \mu\text{m s}^{-1}$ and 5 m s^{-1} , the index obtained at the higher velocity is lower ($\Delta T = 12.7 \text{ }^\circ\text{C}$) as if some beneficial effect on the brittleness of the material was obtained when increasing the velocity. This is likely caused by the temperature increase reported hereafter. In any case, measured differences remain very small compared to other materials [44].

5.2.2. Ductile tearing

Quantitative measurements of ductile tearing were obtained from a fractographic analysis using SEM observations. From the observation of ductile area at different magnifications, the area of the ductile tearing in front of the notch was delimited and measured as a surface integral. Only the ductile area near the notch was measured (see e.g. Fig. 8a) and the final ductile area (on the other side of the notch) was not considered. Dividing the area measurement by the initial thickness of the specimen ($W = 10 \text{ mm}$), an average ductile crack length, Δa_{av} , was determined. Moreover, due to the tunneling effect and material inhomogeneity, the distance between the notch root and the ductile crack front varies along the notch. The maximum length of this distance, Δa_{max} , was also measured. For all specimens, Δa_{av} and Δa_{max} were measured at the three test velocities. Results are reported in Fig. 5.

Fig. 5 shows that for a given impact velocity, a clear correlation exists between the ductile crack length (both average and maximum) and the CVN energy for the tests performed at different temperatures, ductile crack length being an increasing function of the CVN energy. Influence of the testing velocity was presented elsewhere [14] and is recalled on Fig. 5a and b. For both Δa_{max} and Δa_{av} , for a given CVN energy, the ductile crack length is longer for quasi-static than for dynamic testing. Remembering that in the ductile–brittle transition range, similar CVN energy values are obtained under static and dynamic conditions (see Section 5.2.1), it has to be kept in mind that the length of the ductile crack is different (longer) for quasi-static tests. Similar relation between the T–S (transverse–short transverse) CVN energy and the ductile areas measured close to the notch on a similar steel has been recently found [16] and was also reported in other bainitic steels [45]. This shows that the CVN energy alone cannot account for the physical phenomena

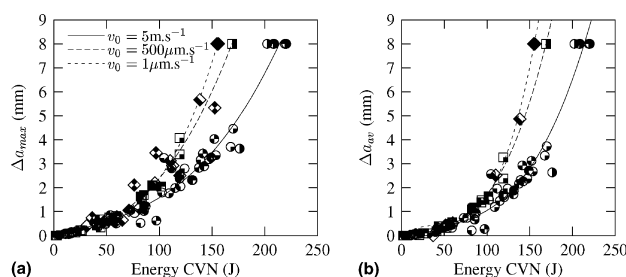


Fig. 5. Loading rate effect on ductile crack length. (a) Maximum ductile crack length. (b) Average ductile crack length. Round, square and losange symbols are for dynamic, intermediate and quasi-static loading velocity, respectively. For each symbol shape, a given pattern represents a given temperature.

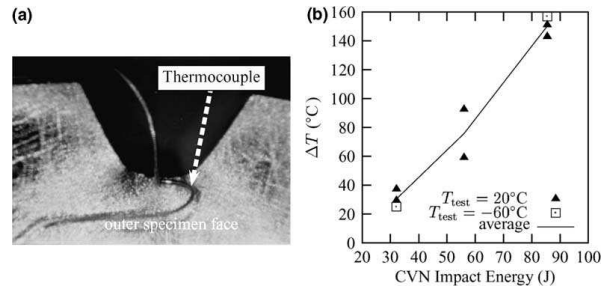


Fig. 6. Temperature increase during Charpy test. (a) Location of the tiny thermocouple at the notch tip. (b) Temperature rise versus impact energy measured at notch tip during interrupted Charpy-V tests.

occurring during failure. More precisely, this means that the same energy can be reached for different crack advances and that the whole force–displacement curve must be considered.

5.2.3. Notch root temperature rise

Quite significant increases of the notch root temperature, ΔT , were measured through interrupted low blow tests performed at -60 and 20 °C (Fig. 6b). It should be kept in mind that these temperature increases were measured on the lateral surfaces of the specimens. Results obtained with FE simulations showed that, as far as ductile crack growth is not too important, the temperature increases are larger in the mid-section of the specimen where plane strain conditions are prevailing [12]. This means that the ΔT increases reported in Fig. 6b underestimate the temperature increase in the region where brittle failure occurs more likely. Moreover these increases must be considered as values averaged over distances comparable to thermocouple dimensions (~ 0.1 – 0.2 mm) welded at a position located at about 0.1 mm from the notch root. This also contributes to underestimate actual temperature increases.

The local temperature measurements raise another key point when modelling Charpy impact test is envisaged. Should the test be modelled under isothermal conditions, adiabatic conditions or under mixed conditions with heat diffusion? Simple calculations using the thermal conductivity of A508 steel ($D \sim 2 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$) show that in a test lasting 1 ms the characteristic heat diffusion distance is of the order of 0.15 mm. Typical load versus time curves were presented elsewhere [14]. It can be shown that in the lower shelf regime the time to failure is so short that it can be assumed that fracture occurs under adiabatic conditions. On the other hand, when the value of the CVN energy is larger than about 100 J ($T \gtrsim -50$ °C) the time to failure is such that adiabatic conditions only constitute an approximation. Effects of local heating on the stress–strain state in the active process zone are presented in the companion paper (part II) [1] which illustrates the importance of taking into account the temperature increase when a local criterion is used to predict fracture in the ductile–brittle transition range (when cleavage fracture is preceded by ductile crack propagation).

5.3. Ductile crack initiation and growth in Charpy V-notch specimens

In this section, a particular attention is paid to the ductile crack initiation and propagation in Charpy V-notch specimens. Low blow Charpy tests performed at -60 °C and room temperature have been used to evaluate the ductile crack initiation and growth micromechanisms. The specimens were then broken at liquid nitrogen temperature in order to avoid any further macroscopic plastic deformation and ductile

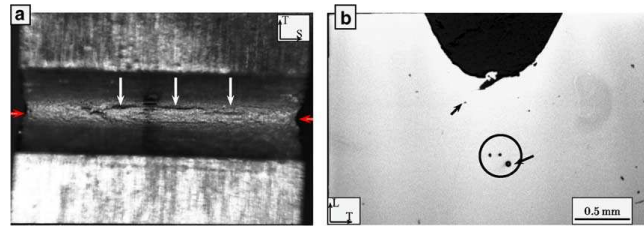


Fig. 7. Ductile crack initiation at the notch of a Charpy V-notch specimen. $T = -60\text{ }^{\circ}\text{C}$, CVN = 32 J. (a) Ductile tearing at the notch tip is indicated by white arrows. (b) Mid-section of a Charpy specimen. Cavities are indicated by a black arrow.

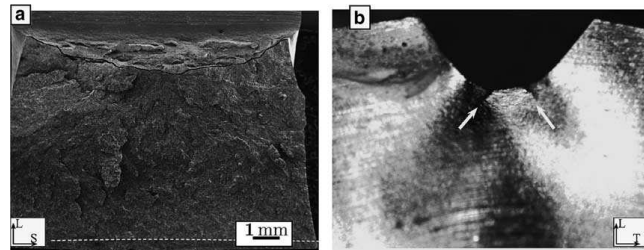


Fig. 8. Ductile crack growth from the notch of a Charpy V-notch specimen. $T = -60\text{ }^{\circ}\text{C}$, CVN = 85 J. (a) Fracture surface with a tunneling effect of ductile crack growth. (b) Lateral specimen surface where fracture gives rise to the formation of shear lips (indicated by white arrows).

growth. Usually, the load-line displacement curve is used to separate the initiation and growth energy [46] and it is generally considered that ductile crack propagation roughly initiates at maximum load [47].

Observation of the ductile crack initiation for a test interrupted at a load lower than the maximum load (CVN = 32 J) is reported in Fig. 7. In Fig. 7a the ductile crack initiation at the notch tip is indicated by arrows. Observation in the mid-section of the specimen displayed in Fig. 7a is reported in Fig. 7b. It is shown that crack initiation from the notch occurs by the formation of a shear band about 100 μm long, and the formation of cavities nucleated from non-metallic (e.g. MnS) inclusions located ahead of the notch tip. Macroscopically ductile crack initiation is located close to the mid-section of the specimen as shown in Fig. 7a. Macroscopic ductile crack growth stages are displayed in Fig. 8a and b where a fracture surface of a test interrupted just beyond the maximum load (CVN = 85 J) and formation of shear lips at the specimen lateral surfaces are shown, respectively.

Fig. 8a reveals that ductile crack growth occurred with a tunneling effect, crack extension being more important in the mid-section than at the lateral surfaces. From Figs. 7 and 8a, ductile crack initiation and propagation stages in the Charpy specimen are explained as follows. At first, a ductile crack is formed at the center of the notch root after yielding, for a load lower than the maximum load. As ductile crack propagates ahead of the notch, it spreads laterally and reaches the lateral surfaces by shear lips formation. At this step, the crack length in the mid-section of the specimen is about 1 mm, and the load is just beyond the maximum load. Then the crack propagates through the thickness of the specimen with a decreasing load. Further propagation occurs with formation of shear lips at the outer surface. It is worth noting that the energy absorbed for shear lips formation is not negligible compared to the total CVN energy [46].

6. Fractographic examinations

Fractographic examinations were carried out to investigate the damage processes in the brittle and ductile regimes. In the first case, the nature and location of the cleavage triggering sites were studied and any modification in the DBT range was investigated. In the second case, nucleation of microvoids around second phase particles was investigated in order to determine a nucleation plastic strain threshold appropriate to the material of this study. This information will be used in the numerical models (Part II).

6.1. Methodology

The fracture surfaces of all the Charpy specimens that failed by cleavage during testing were examined in detail using a scanning electron microscope (SEM) to locate the origin of cleavage fracture and determine the nature of particles initiating fracture. In all the specimens, the cleavage mechanism is transgranular, and no intergranular decohesion has been found. Triggering sites were identified by following a network of radiating major tear and river lines. At low temperature, more than one cleavage initiation site can be found, independently of the impact velocity [48]. However, it should be mentioned that because of the difficulty of such observations, it could be sometimes difficult to differentiate the main triggering site from secondary ones. When the rivers pattern does not help to identify clearly which site is at the origin of unstable fracture, the site closer to the notch tip is taken as the principal one.

Localisation on the fracture surface of the identified triggering sites was the second step in the fractographic study. Each site was quantified by the distance, x , from the edge of the specimen to the cleavage triggering site, by the distance, y_1 , from the notch to the triggering site and distance, y_2 , from the ductile crack front to the triggering site. At low temperatures when fracture occurs before ductile crack growth, $y_1 = y_2$. A similar methodology to locate the initiating sites was already applied in other studies [11]. The positions x , y_1 and y_2 are depicted in Fig. 9.

6.2. Cleavage triggering sites

Different natures of triggering sites have been identified: large facets with low misorientations (hereafter referenced type I), iron carbides (seldom) or second phase particle (TiC) (type II) or manganese sulfide

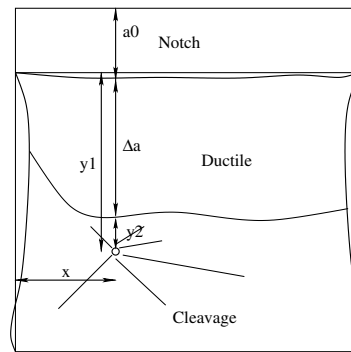


Fig. 9. Quantities measured in Charpy specimens during fractographic study.

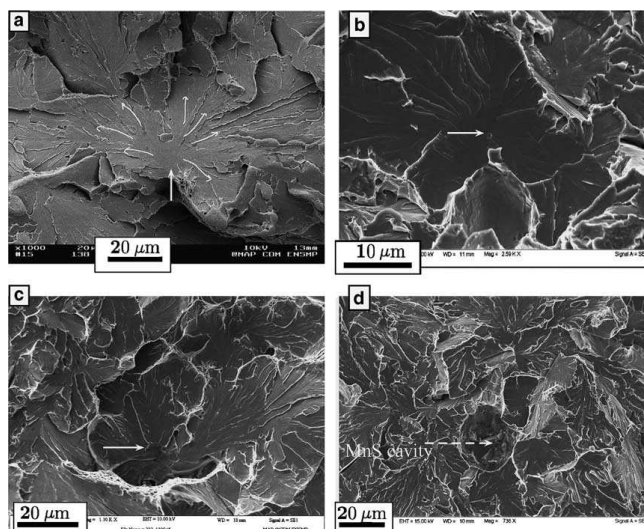


Fig. 10. Different types of cleavage triggering sites. (a) Several facets with low misorientations. (b) Cementite carbide associated with a ductile cavity. (c) Second phase particle (TiC). (d) Manganese sulfide inclusion.

inclusions without any ductile tearing (Type III) or associated with a ductile tearing zone (type IV) (Fig. 10). Most often, due to the initiation on grain boundaries, no particular feature was found. In this last case, when cleavage rivers patterns were clearly evidenced but it was not possible to clearly identify the nature of the site, they will be referenced as “Non Identified” (NI) sites. Keep in mind that a site showing microscopic rivers converging towards a grain boundary or ductile crack tip was classified as NI sites (Fig. 11). Increasing the test temperature close to the ductile–brittle transition, only one main nucleation site was found in almost all the cases.

Locations of the triggering sites on the fracture surfaces of Charpy specimens for the dynamic tests ($v_0 = 5 \text{ m s}^{-1}$) are reported in Fig. 12 as a function of their nature. Sites where MnS inclusions were found (Type III and IV) are put together in Fig. 12d. In this figure the closed symbols represent the distance of the cleavage triggering sites to the notch root (y_1) and the open symbols the length of the ductile crack measured at the cleavage site position ($y_1 - y_2$). Regardless of the nature of the sites, all of them are located at least at 1.9 mm of the sides of the specimen, reflecting the need to reach at least a critical stress so that cleavage can be triggered. As the ($y_1 - y_2$) distance (i.e. the ductile crack length) increases, the position of the site moves towards the center of the specimen, resulting from the tunneling effect (the ductile crack is longer at the center of the specimen) occurring with ductile crack propagation (see Fig. 8a). As the average ductile crack growth increases with temperature, a temperature effect for the highest temperatures on the distance x could also be evidenced as recently mentioned in [15] and is shown in Fig. 12. No correlation between the distance x and the nature of the sites has been evidenced.

Lower temperatures (lower distance $y_1 - y_2$) are more favorable for a triggering phenomenon which is more homogeneously distributed along the thickness of the specimen because of a more homogeneous stress state. From the observations made in this study the nature of the triggering cleavage sites does not appear to change with higher ductile crack length, i.e. higher energy (see Fig. 5). In particular type IV sites

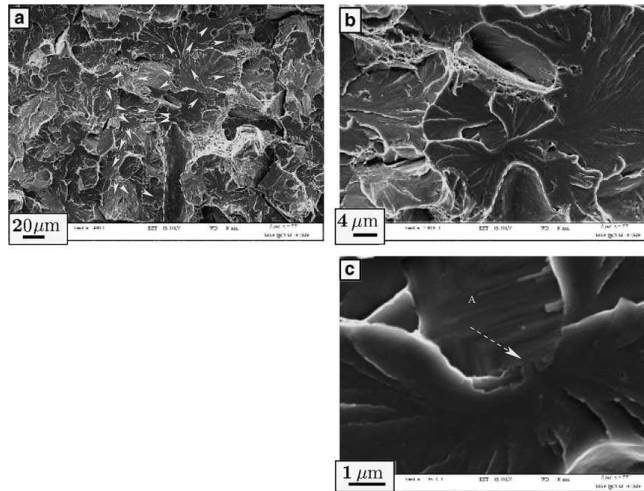


Fig. 11. Example of a triggering cleavage site located at the vicinity of a large elongated ductile cavity. (a) Convergence of the cleavage microscopic rivers ahead of a ductile cavity. (b) Location of the triggering site close to the cavity. (c) Higher magnification reveals a zone with slip lines prints (A) without any microscopic cleavage rivers, potential cleavage initiation location is indicated by a white arrow. $T = -60$ °C, CVN = 50 J.

could be found for both small and large ductile crack propagation (see Fig. 8d). For higher energies, large facets (or several facets) with low misorientation are still found on the fracture surface (Fig. 12b).

The variations of γ_1 with temperature and CVN energy is reported in Fig. 13a and b, respectively. On these graphs the mean ductile crack growth, Δa_{av} , preceding brittle cleavage fracture is also given. As observed for ductile crack growth, a large scatter is observed when examining the variation of γ_1 for a given temperature. However the mean trend is an increase of γ_1 with increasing temperature. Much less scatter is observed when the values of γ_1 are plotted as a function of the CVN energy (Fig. 13b), reflecting the increasing amount of ductile crack growth, which dissipated a large part of the energy involved in the fracture process. The results given in Fig. 13b also show another effect: the position of the cleavage initiating sites is located between 0.5 and 1 mm from the mean ductile crack front, except at large values of the CVN energy where the cleavage triggering sites are closer to the crack front. As previously mentioned, no correlation between the triggering cleavage site nature and temperature or CVN energy was observed.

The distance between the cleavage triggering site and the ductile crack front, y_2 , is reported in Fig. 14a and b as a function of test temperature and CVN energy, respectively. The nature of the sites is pointed out by different symbols. Here, y_2 is only given for dynamic tests ($v_0 = 5 \text{ m s}^{-1}$), results at quasi-static and intermediate velocities can be found in [12]. Here it should be only recalled that a loading rate effect could be inferred for the y_2 distance. For dynamic impact testing ($v_0 = 5 \text{ m s}^{-1}$), the triggering sites are located between 0.01 and 1.2 mm from the ductile crack front, with a mean distance of 0.5 mm. For the lowest velocity, the distance y_2 varies between 0 and 0.42 mm, the main part of the sites being located at less than 0.1 mm from the ductile crack front. For the dynamic tests, y_2 appears to be closer to the ductile crack front for the highest CVN energy, but this trend needs to be confirmed by further tests. From the results obtained in this study, the distance y_2 cannot be correlated with the nature of the cleavage triggering sites.

B. Tanguy et al. / Engineering Fracture Mechanics 72 (2005) 49–72

63

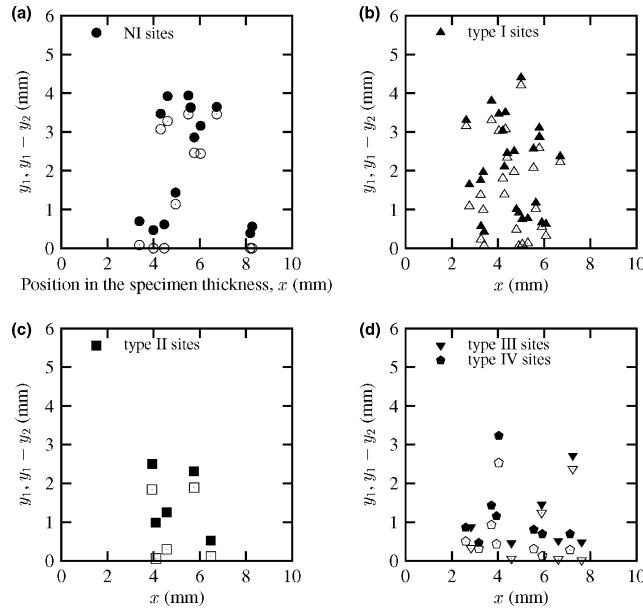


Fig. 12. Location of the triggering cleavage sites on the fracture surface of Charpy specimen as a function of their identified nature. Closed symbols (y_1), open symbols ($y_1 - y_2$).

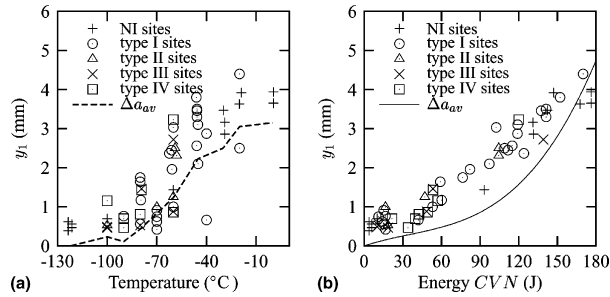


Fig. 13. Distance between notch tip and cleavage triggering sites with the nature of cleavage sites. (a) with temperature. (b) with CVN energy.

6.3. Discussion on the nature of cleavage triggering sites

To predict in a non-empirical way the ductile–brittle Charpy curves, approaches based on a description of local fields and on the use of appropriate models have been employed. In the DBT region these models should be able to describe the ductile crack growth preceding cleavage fracture and the cleavage mechanism

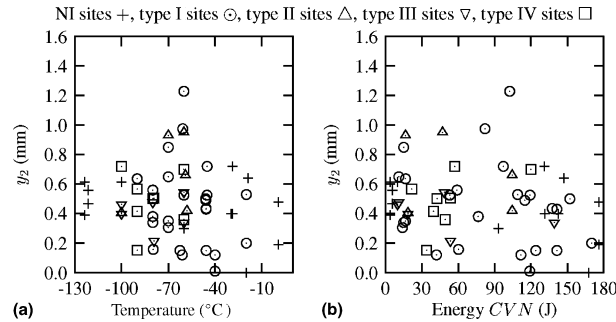


Fig. 14. Distance between ductile crack front (or notch tip when $\Delta a = 0$) and cleavage triggering sites with the nature of cleavage sites. (a) With temperature. (b) With CVN energy.

provided that an accurate description of the local stress–strain fields is obtained. In many studies ductile crack growth was successfully described using fully coupled model like GTN model [49] or Rousselier model [50]. To describe cleavage at low temperature (where transgranular cleavage is the only mechanism), the Beremin model [26] was successfully applied to predict the fracture toughness variation of A508 steels. This model is based on a temperature and strain-rate independent critical cleavage stress and on the weakest link theory. As other brittle fracture models [51] it is based on the postulated behavior of a population of microcracks (e.g. originating from carbides or small MnS particles) induced by plasticity, and one of the hypothesis is that the nature of the defects remains the same with temperature change as long as cleavage mechanism is concerned. The role of MnS inclusions on the initiation of cleavage of quenched and tempered A508 steel in the DBT region was first mentioned in Rosenfield's studies [20,52] where isolated small round inclusions ($\sim 1 \mu\text{m}$) were found to be at the origin of cleavage river patterns in ferritic grains. Such small MnS were also observed to be at the origin of cleavage at low temperature on low sulfur ($S < 0.005 \text{ wt.}\%$) A508 Cl3 steel [18].

Recent studies [11,15,22,23,53] on the ductile–brittle transition of an A508 Cl3 steel mentioned that the presence of manganese sulfide inclusions clusters has been observed in the region where cleavage was initiated leading to the formation of some ductile islands in front of the main ductile crack front. The role of MnS clusters was first evidenced on axisymmetric notched specimens [22] and then confirmed on Charpy and CT(1T) specimens [11,15] on the same material. From these observations the role of MnS clusters appears to be more and more important as the testing temperature increases, representing almost 100% of the sites at $-30 \text{ }^\circ\text{C}$ for Charpy specimens [15] (CVN energies between 20 and 100 J).

The difficulties in the quantitative prediction of the sharp upturn in the ductile–brittle transition region were then explained by a change in the nature of active triggering site (weak spots) with increasing temperature, the large MnS inclusions or clusters being the weak spots at the origin of cleavage triggering instead of carbides or small round MnS inclusions [15,22,23]. A model based on the MnS clusters was proposed in order to explain the sharp upturn of the Charpy curve in the ductile–brittle transition range [22,23]. Following this model, the transition upturn is physically based on a change in the nature of the defects (particles/inclusions) at the origin of the cleavage as the temperature increases, leading to the conclusion that MnS inclusions clusters play an increasing role for higher energies and are at the origin of the cleavage triggering mechanism.

Contrarily to some of the above studies [15,22,23], the present observations on a very similar A508 Cl.3 (same heat treatment) but with a lower content of sulfur (0.004% instead of 0.008% for the previously

mentioned studies) have not evidenced an increasing role of MnS inclusions with temperature (see Fig. 8d), manganese sulfide inclusions clusters being even very scarcely observed on Charpy specimen fracture surfaces in this steel. However the sharp upturn in the Charpy curve is observed and is very similar to the behavior reported in these studies. A comparison of Charpy transition curves for both steels was given in [54]. Both steels present a sharp upturn in the ductile–brittle transition region. However these Charpy curves [54] were obtained with Charpy specimens tested in different orientations (T–L and T–S) so that direct quantitative comparison on the DBT temperature between these two materials cannot be made.

The discrepancy between these results could be explained by the following reasons. (i) The higher sulfur content in the previous studies (twice higher than in this study) leading to a higher propensity to form MnS inclusions and clusters. Based on [55], it seems that a critical density of MnS inclusions is necessary to enhance the role of these clusters. (ii) The effect on cleavage fracture of the orientation MnS inclusions (which can be elongated) with respect to the crack propagation direction needs to be clarified. In the present study, the length of MnS inclusions is perpendicular to the ductile crack front whereas it was parallel in the above mentioned studies. The role and anisotropy induced by MnS inclusions on ductile behavior of steel is well known [37,56] and models leading to an accurate description of the induced mechanisms have been developed [57,58]. However the role of large MnS inclusions on the initiation of cleavage fracture under large scale yielding conditions is not yet clear. Particularly, the influence of MnS inclusions or clusters located ahead of a growing ductile crack front has still to be investigated.

The DBT of the investigated steel is lower than that of the steel studied in [55]. This is possibly directly related to the lower sulfur content which reduces the number of cleavage initiation sites and avoids MnS clustering. Recent 3D numerical simulations assuming that a MnS cluster is an ellipsoidal void whose dimensions were experimentally determined, and applying to it boundary conditions corresponding to the stress state in front of a propagating ductile crack growth in a CT specimen, have shown that generalized plasticity occurrence leads to quite different conclusions to what can be expected from an elastic analysis [24]. Based on the mechanical properties of A508 steel described in [15,22], numerical computations show that the unloading effect due to generalized plasticity is larger than the stress concentration effect due to the shape of the cavity. The cleavage fracture probability obtained with Beremin model is not therefore largely affected by the presence of such a defect.

Based on the present observations, there is no drastic change in the nature of the observed cleavage triggering sites when the CVN energies increase, keeping in mind that a number of sites were not identified and that the number of these NI sites increases at higher energies. Among these NI sites, cleavage triggering on grain boundaries was observed. More observations are needed to confirm an increasing importance of plasticity induced mechanisms like dislocations pile up (e.g. Stroh or Cottrell mechanisms [59,60]). Some possible explanations to the micromechanisms at the origin of the difficulty to initiate cleavage fracture in the upper DBT range for bainitic steels can be inferred from the literature: (i) higher propensity of the matrix to arrest microcracks cleavage propagation, (ii) a different mechanism at the origin of cleavage initiation. These two hypothesis are developed hereafter.

(i) The role of MnS clusters in A508 steel with high sulfur content could be directly linked to the first point. Cleavage facets located between a fatigue crack tip and a MnS cluster on a CT specimen were reported once [15]. MnS clusters were then presented as potential cleavage cracks arrestors. However based on this observation their role in a cleavage initiation cannot be confirmed in the DBT range. For A508 steel with low sulfur content, direct evidence of cleavage microcracks arrest was not shown in the literature as it was the case for A533 [61] and C–Mn [62] weld steels. Careful examination of the interface between ductile crack front and main cleavage area can however show features that can be interpreted as cleavage microcracks arrest event. Such event is reported in Fig. 15. This figure shows a cleavage area surrounded by ductile tearing at the interface between the main ductile crack and the main cleavage area. It is clear that the cleavage microrivers in the cleavage area surrounded by ductile dimples are independent of the main cleavage crack propagation. In this area, cleavage was found to have initiated on a small round MnS

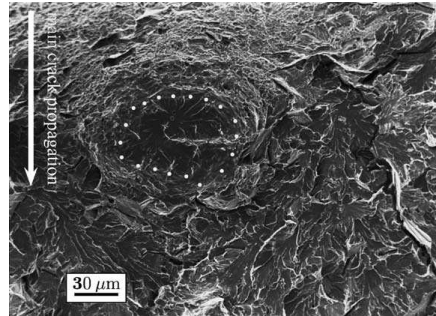


Fig. 15. Microcracks cleavage area surrounded by ductile tearing at the interface between main ductile crack growth and cleavage fracture. The ductile crack propagates from top to bottom. The cleavage microcracks observed in the cleavage area surrounded by ductile tearing (top center of the figure) are independent on the main cleavage propagation, $T = -80$ °C.

particle. The size of this area corresponds approximately to one or two bainitic packets. One possible interpretation of this micrograph is that during the main ductile crack propagation, a cleavage microcrack has propagated and then arrested on ductile damage developed ahead of the ductile crack front (or on another microstructural barrier). Then main cleavage fracture was triggered at another location where no microstructural features was able to arrest it. Importance of cleavage arrest events related to the increase of test temperature has already been observed in HSLA bainitic steels [63]. For these steels a temperature dependence of local toughness of grain boundaries was introduced to explain a change in the size of the critical microstructural event controlling cleavage propagation. Formation of a transgranular microstructure playing the role of additional barriers has been evocated by Margolin et al. [64,65] to introduce a plastic strain dependence of the critical stress controlling the propagation of cleavage fracture on an 2Cr–Ni–Mo–V pressure vessel steel. Further investigations have to be carried out to confirm this mechanism in bainitic A508 Cl.3 steels.

(ii) A change in the micromechanisms controlling cleavage fracture in the DBT range to explain the observed sharp upturn was also recently discussed in the literature [24]. Based on thin foils observations (TEM), a change of the triggering cleavage plasticity mechanisms, as mechanical twins or shear bands presence was observed [66] and could be the physical micromechanism at the origin of the sharp upturn in the DBT range for tempered bainitic A508 steel. Further investigations using TEM and EBSD techniques should provide a better understanding and clarify the different hypothesis.

6.4. Nucleation around second phase population

Nucleation around second phase population is well known to play an important role in the ductile damage mechanisms, as much at the beginning of the deformation history, as during the coalescence phase (localised necking) [31]. The role of Fe_3C carbides in the nucleation of microcavities and in the localisation of the deformation is illustrated in Fig. 16 for the steel of this study. Fig. 16a corresponds to a SEM zoom of the ductile crack shown in Fig. 7b. In this figure the crack tip is located on the top right corner. Following the slip lines path a ductile crack propagates between a sharp crack and a ductile cavity nucleated from a MnS located ahead of the crack tip. In this zone where plastic strain levels are very high, nucleation of microcavities develops from Fe_3C carbides as observed in Fig. 16c. Fig. 16b shows a path between the sharp crack tip and the void (indicated by white arrows). Along this path, nucleation of microcavities has

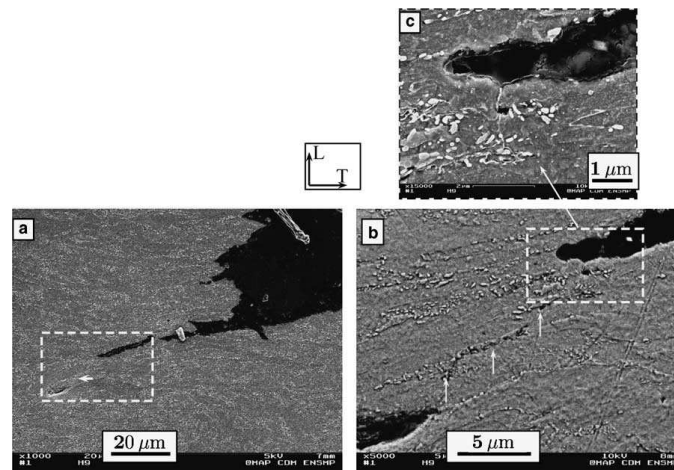


Fig. 16. Mechanism of microscopic ductile crack growth at the macroscopic ductile crack initiation at a Charpy V-notch tip. (a) Zoom of the ductile crack at notch tip in Fig. 7b. (b) Microvoids nucleation at Fe_3C carbides along strain localisation path. (c) Microvoids nucleation close to the ductile crack tip.

originated around Fe_3C carbides due to the localisation of the deformation. It shows the crucial role of such particles in the larger voids linking process by softening the material and in the coalescence mechanism.

Based on the numerical work by Chu and Needleman [67], most of the studies describing the nucleation around a second phase population have used a Gaussian distribution of the nucleation strain around a mean equivalent plastic strain, $\bar{\epsilon}_N$, adding three new parameters for the modelling of the ductile damage. Most often two of the nucleation parameters are directly taken from numerical pioneering studies [49,68], and the third one is adjusted either on experimental macroscopic curves or indirectly [69]. However it was shown that the role of the second phase population on the failure mechanism strongly depends on the value of $\bar{\epsilon}_N$ [70], and that it is desirable to obtain them directly from the metallurgical analysis of the material.

In the present study, the experimental procedure presented in [71] was followed: Charpy specimens loaded to a predetermined amount of energy (low blow tests) and axisymmetric notched bars loaded either to fracture or to prescribed reductions of area corresponding to severe deformation were observed with SEM, after etching with Vilella solution, in longitudinal sections located on the central axis (Fig. 17a). As previously stated, these observations have shown that secondary voids are nucleated on cementite (Fe_3C) carbides (Fig. 17b). Estimation of the plastic strain threshold was obtained by finite element analysis [12]. The plastic strain at the location where voids around Fe_3C were firstly observed was taken as the plastic threshold for the nucleation around second phase population. A plastic threshold of about 0.5 was found and then considered for the simulations presented in the companion paper [1].

7. Summary and conclusions

One heat of a low sulfur (0.004 wt.%) pressure vessel A508 steel, representative of modern steels used for the fabrication of nuclear pressure vessels, with a quenched and tempered microstructure has been thoroughly investigated. The main aims of this investigation were to identify the micromechanisms responsible

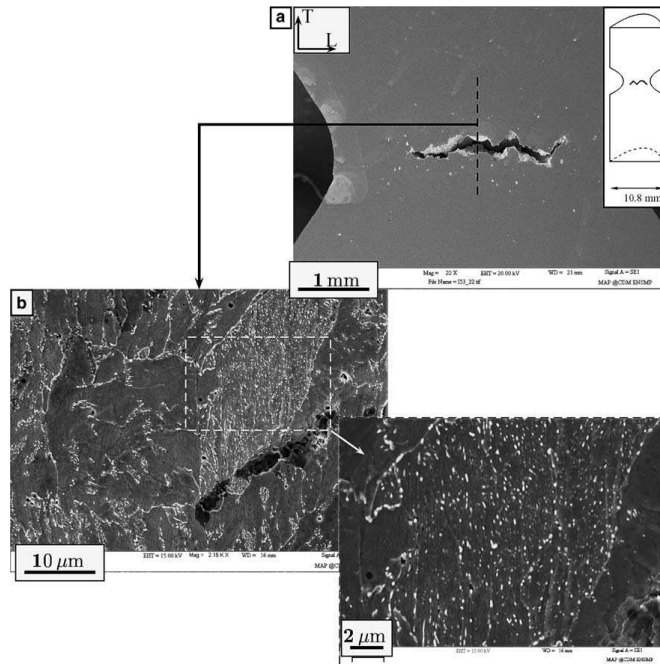


Fig. 17. Scanning electron micrographs of longitudinal section showing. (a) Specimen orientation. (b) Voids around Fe_3C particles.

for the ductile to brittle transition and to determine the input data necessary for modeling this transition. Mechanical tests and microfractographic observations have been performed on smooth tensile specimens, notched bars and on Charpy V-notch specimens.

The mechanical response of smooth bars was found to be strongly temperature and strain-rate dependent when tested over range of temperature (-196 °C, 100 °C) and strain-rates ($4 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$, $4 \times 10^3 \text{ s}^{-1}$). These tests on smooth bars are useful for the identification of the constitutive laws used in the numerical simulations of Charpy V-notch specimens.

Quasi-static tests on notched specimens with different notch radii and thus different stress triaxiality ratios showed that the ductile to brittle transition behavior was dependent on specimen geometry. All the quantities (stress–strain curves, strains and stresses to failure) necessary to identify the models used for ductile rupture and cleavage fracture were measured over the temperature range corresponding to a single mechanism of failure. In particular, the scatter in cleavage test results obtained on these notched specimens can be used to develop a statistical model for cleavage fracture.

Charpy V-notch tests were carried out over a wide temperature range between -196 and 100 °C, using three widely different loading rates ($1 \mu\text{m s}^{-1}$, $500 \mu\text{m s}^{-1}$ and 5 m s^{-1}). In this steel, no apparent drastic effect of the loading rate on the ductile to brittle transition temperature was noted. However it was observed that the upper shelf energy increases significantly with loading rate. Local measurement of temperature using tiny thermocouples welded very close (0.1 mm) to the notch tip revealed a significant heating effect

during impact testing at 5 m s^{-1} corresponding to quasi-adiabatic conditions. Temperature increases of the order of $150 \text{ }^\circ\text{C}$ were detected when an impact energy of 85 J corresponding to the ductile to brittle transition was applied. These temperature increases are likely largely underestimated. Measurements of ductile crack growth preceding cleavage fracture in the transition regime were made. The tunneling effect due to preferential ductile crack growth in the center of Charpy specimens was evidenced and quantitatively studied. This indicates that a 3D modeling must necessarily be adopted for simulating Charpy V-notch test.

Detailed microfractographic observations showed that cleavage cracks were initiated from different types of nucleation sites including: (i) large facets with low misorientations, (ii) iron carbides, second phase particles (TiC) or manganese sulfide (MnS) inclusions. The nature of these sites and their positions with respect to the notch tip and the location of advancing ductile crack front were systematically determined. No systematic variations in the nature of cleavage initiating sites with test temperature were evidenced. In particular, no preferential initiation from MnS inclusions at increasing temperature was observed, contrarily to other observations reported in the literature. This situation is likely due to the low sulfur content present in this material. Cleavage initiating sites were shown to be preferentially located in the mid-section of the Charpy specimens, which again underlines the importance of 3D simulations. The position of the cleavage triggering sites was observed to be closer to the ductile crack growth front when the impact energy corresponds to the upper part of the DBT range. This suggests that the position of the maximum principal stress ahead of an 3D propagating crack should shift nearer to the crack front for increasing crack advances.

Further metallographic and fractographic observations showed that ductile rupture involved a double population of cavities. In addition to those easily initiated from large MnS inclusions, smaller cavities initiated from Fe_3C particles were observed. A quantitative analysis performed on notched bar specimens showed that these smaller cavities corresponding to the second population were initiated after relatively large strains (>0.5) contrarily to the situation associated to MnS particles which easily separate from the matrix. These observations are useful to simulate ductile damage using the mechanics of porous ductile materials with a nucleation law for ductile damage based on experimental observations.

Acknowledgements

Financial support from Direction de la Sûreté des Installations Nucléaires (DSIN) and Electricité de France (EdF) is acknowledged. Technical support from B. Marini (CEA–Saclay), Y. Grandjean (EdF–Chinon), J. Clisson (CTA–Arcueil) and G. Brabant (EMP) is also greatly acknowledged.

References

- [1] Tanguy B, Besson J, Piques R, Pineau A. Ductile to brittle transition of a A508 steel characterized by the Charpy impact test. Part II: modeling of the Charpy transition curve. *Engng Fract Mech*, in press.
- [2] Ritchie RO, Server W, Wullaert R. Critical fracture stress and fracture strain models for the prediction of lower and upper shelf toughness in nuclear pressure vessel steels. *Met Trans A* 1979;10A:1557–70.
- [3] Xia L, Cheng L. Transition from ductile tearing to cleavage fracture: a cell-model approach. *Int J Fract* 1997;87:289–306.
- [4] Goldthorpe M, Wiesner C. Micromechanical prediction of fracture toughness for pressure vessel steel using a coupled model. In: Panotin T, Sheppard S, editor. *Fatigue and fracture mechanics*, vol. 29. ASTM STP 1332. 1999. p. 341–63.
- [5] Eripret C, Lidbury D, Sherry A, Howard I. Prediction of fracture in the transition regime: application to an A533B pressure vessel steel. In: *Les Editions de Physique*, editor. 1st European mechanics of materials conference on local approach to fracture. *J Phys IV*, vol. 6. Fontainebleau, 9–11 September 1996. p. C6-315–23.
- [6] Bernauer G, Brocks W, Schmitt W. Modifications of the Beremin model for cleavage fracture in the transition region of a ferritic steel. *Engng Fract Mech* 1999;64:305–25.

- [7] Böhme W, Bernauer G, Schmitt W. Scatter of a ferritic steel in the transition region analyzed by Charpy tests and dynamic tensile tests. *Nuc Engng Des* 1999;188:149–54.
- [8] Schmitt W, Sun DZ, Bernauer G, Nagel G. New approaches to improve the RPV materials database. *Nucl Engng Des* 1998;183:1–8.
- [9] Heerens J, Hellmann D. Development of the Euro fracture toughness dataset. *Engng Fract Mech* 2002;69:421–49.
- [10] Howard I, Li Z, Sheikh M. Local approach predictions of transition behaviour of specimens and structures. In: 20 years of R6, proceedings of one-day seminar organised by the Materials and Mechanics of Solids Group, IMechE HQ, London, 1996. p. 9.
- [11] Mantyla M, Rossoll A, Nedbal I, Prioul C, Marini B. Fractographic observations of cleavage fracture initiation in a bainitic A508 steel. *J Nucl Mater* 1999;264:262–75.
- [12] Tanguy B. Modélisation de l'essai Charpy par l'approche locale de la rupture. Application au cas de l'acier 16MND5 dans le domaine de la transition, PhD thesis, Ecole des Mines de Paris, 2001. Available from: <http://pastel.paristech.org/documents/disk0/00/00/02/28/index.html>.
- [13] Tanguy B, Besson J, Piques R, Pineau A. Numerical modeling of Charpy V-notch tests. In: François D, Pineau A, editors. From Charpy to present impact testing. ESIS Publication 30, 2002. p. 461–8.
- [14] Tanguy B, Piques R, Pineau A. Experimental analysis of Charpy V-notch 19 specimens. In: François D, Pineau A, editors. From Charpy to present impact testing, ESIS Publication 30, 2002. p. 453–60.
- [15] Rossoll A, Berdin C, Prioul C. Determination of the fracture toughness of a low alloy steel by the instrumented Charpy impact test. *Int J Fract* 2002;115:205–26.
- [16] Hausild P, Nebdal I, Berdin C, Prioul C. The influence of ductile tearing on fracture energy in the ductile-to-brittle transition temperature range. *Mater Sci Engng A* 2002;335:164–74.
- [17] Gibson G, Capel M, Druce S. Effect of heat treatment on the fracture toughness transition properties of an A508 Class 3 steel. In: Blauel J, Schwalbe K-H, editors. Defect assessment in components—fundamentals and applications, ESIS/EGF9. Mechanical Engineering Publications; 1991. p. 587–611.
- [18] Druce S, Gibson G, Capel M. Microstructural control of cleavage fracture in an A508 steel class 3 pressure vessel steel. In: Ernst H, Saxena A, McDowell D, editors. Fracture Mechanics: Twenty Second Symposium, vol. I. ASTM STP 1131, 1992. p. 682–706.
- [19] Zhang X, Knott J. The statistical modelling of brittle fracture in homogeneous and heterogeneous steel microstructures. *Acta Mater* 2000;48:2135–46.
- [20] Rosenfield A, Shetty D, Skidmore A. Fractographic observations of cleavage initiation in the ductile–brittle transition region of a reactor-pressure-vessel steel. *Met Trans A* 1983;14:1934–7.
- [21] Rosenfield A, Shetty D. Cleavage fracture of steel in the upper ductile–brittle transition region. *Engng Fract Mech* 1983;17(5):461–70.
- [22] Renevey S, Carassou S, Marini B, Eripret C, Pineau A. Ductile–brittle transition of ferritic steels modelled by the local approach to fracture. In: Les Editions de Physique, editor. 1st European mechanics of materials conference on local approach to fracture. *J Phys IV*, vol. 6. Fontainebleau, 9–11 September, 1996. p. C6-343–52.
- [23] Carassou S, Renevey S, Marini B, Pineau A. Modelling of the ductile to brittle transition of a low alloy steel. In: ECF 12, Fracture from defects, vol. II, 1998. p. 691–6.
- [24] Hausild P, Bompard P, Berdin C, Prioul C, Karlik M. Influence of ductile tearing on cleavage triggering in ductile-to-brittle transition of A508 steel. In: François D, Pineau A, editors. From Charpy to present impact testing. ESIS Publication 30, 2002. p. 79–86.
- [25] Gurovich B, Kuleshova E, Lavrenchuk O. Comparative study of fracture in pressure vessel steels A533B and A508. *J Nucl Mater* 1996;228:330–7.
- [26] Beremin F. A local criterion for cleavage fracture of a nuclear pressure vessel steel. *Met Trans* 1983;14A:2277–87.
- [27] Moineau D, Frund J, Brochard J, Marini B, Joly P, Guichard D, et al. Local approach to fracture applied to reactor pressure vessel: synthesis of a cooperative 20 programme between EDF, CEA, Framatome and AEA. In: Les Editions de Physique, editor. 1st European mechanics of materials conference on local approach to fracture. *J Phys IV*, vol. 6. Fontainebleau, 9–11 September, 1996. p. C6-243–55.
- [28] Schmitt W, Sun D, Blauel J. Damage mechanics analysis (Gurson model) and experimental verification of the behaviour of a crack in a weld-cladded component. *Nucl Engng Des* 1997;174:237–46.
- [29] Busso E, Lei Y, O'Dowd N, Webster G. Mechanistic prediction of fracture processes in ferritic steel welds within the transition temperature regime. *J Engng Mater Technol* 1998;120:328–37.
- [30] Beremin F. Cavity formation from inclusions in ductile fracture of A508 steel. *Met Trans* 1981;12A:723–31.
- [31] Isacson M, Narström T. Microscopic examination of crack growth in a pressure vessel steel. *Mat Sci Engng A* 1998;241:169–78.
- [32] Narström T, Isacson M. Microscopic investigation of cleavage initiation in modified A508B pressure vessel steel. *Mat Sci Engng A* 1999;271:224–31.
- [33] Franklin AG. Comparison between a quantitative microscope and chemical methods for assessment of non-metallic inclusions. *J Iron Steel Inst* 1969;207:181–6.

- [34] Tanguy B, Piques R, Laiarinandrasana L, Pineau A. Mechanical behaviour of A508 steel based on double nonlinear viscoplastic constitutive equation. In: Miannay D, Costa P, François D, Pineau A, editors. EUROMAT 2000, advances in mechanical behaviour plasticity and damage. Elsevier; 2000. p. 499–504.
- [35] Campbell J, Ferguson W. The temperature and strain-rate dependence of the shear strength of mild steel. *Phil Mag* 1970;21:63–82.
- [36] Beremin F. Calculs élastoplastiques par la méthode des éléments finis d'éprouvettes axisymétriques entaillées circulairement. *J Méc Appl* 1980;4(3):307–25.
- [37] Lautridou J, Pineau A. Crack initiation and stable crack growth resistance in A508 steels in relation to inclusion distribution. *Engng Fract Mech* 1981;15(1–2):55–71.
- [38] Mackenzie A, Hancock J, Brown D. On the influence of state of stress on ductile failure initiation in high strength steels. *Engng Fract Mech* 1977;9:167–88.
- [39] Tanguy B, Besson J. An extension of the Rousselier model to viscoplastic temperature dependant materials. *Int J Fract* 2002;116:81–101.
- [40] Decamp K, Bauvieux L, Besson J, Pineau A. Size and geometry effects on ductile rupture of notched bars in a C–Mn steel: experiments and modelling. *Int J Fract* 1998;88(1):1–18.
- [41] Beremin F. Effect of stress-triaxiality on the ductile tearing and the cleavage fracture of a mild steel. *J Méc Appl* 1980;4(3):327–42.
- [42] Oldfield W. Curve fitting impact test data: a statistical procedure. *ASTM Stand News* 1975:24–9.
- [43] Rolfe S, Barsom J. Fracture and fatigue control in structures. Applications of fracture mechanics. Prentice-Hall, Inc; 1977.
- [44] Lam Thanh L. Acceptabilité de défauts en rupture fragile dans les soudures d'aciers pour tubes: modèles FAD et approche locale. PhD thesis. Ecole des Mines de Paris, 2003.
- [45] Tanguy B, Siegele D. Investigation of the Mastercurve concept relating to applicability for German nuclear power plants for a 22NiMoCr 3-7 material. Tech. Rep., Fraunhofer IWM Institute, Freiburg, 2002.
- [46] Kobayashi T, Takai K, Maniwa H. Transition behaviour and evaluation of fracture toughness in Charpy impact test. *Trans ISIJ* 1967;7:115–25.
- [47] Ma H, Zhu L, Wang Z. Unified correlations in transition temperatures of low alloy steels and weld metals of various toughnesses. *Fatigue Fract Engng Mater Struct* 1996;19:1459–80.
- [48] Rittel D, Tanguy B, Pineau A, Thomas T. Impact fracture of a ferritic steel in the lower shelf regime. *Int J Fract* 2002;117:101–12.
- [49] Tvergaard V, Needleman A. Analysis of cup–cone fracture in a round tensile bar. *Acta Metall* 1984;32:157–69.
- [50] Rousselier G. Ductile fracture models and their potential in local approach of fracture. *Nuc Engng Des* 1987;105:97–111.
- [51] Wallin K, Saario T, Törrönen T. Statistical model for carbide induced brittle fracture in steel. *Met Sci* 1984;18:13–6.
- [52] Rosenfield A, Shetty D. Cleavage fracture of steel in the ductile–brittle transition region. In: Wessel E, Loss F, editors. Elastic–plastic fracture test methods: the user's experience, ASTM STP 856. 1985. p. 196–209.
- [53] Rossoll A, Berdin C, Forget P, Prioul C, Marini B. A local approach to cleavage fracture of A508 steel. In: ECF 12, Fracture from defects, vol. II. 1998. p. 637–42.
- [54] Rossoll A, Tahar al M. Local approach of the Charpy test at low temperature. In: Les Editions de Physique, editor. 1st European mechanics of materials conference on local approach to fracture. *J Phys IV*, vol. 6. Fontainebleau, 9–11 September, 1996. p. C6-279–86.
- [55] Carassou S. Déclenchement du clivage dans un acier faiblement allié: rôle de l'endommagement ductile localisé autour des inclusions. PhD thesis. Ecole des Mines de Paris, 2000.
- [56] Norris S, Parker J. The effect of microstructure on fracture mechanisms of 2.25Cr1Mo low alloy steel, part A: the influence of non-metallic inclusions. *Int J Pres Ves Piping* 1996;67:317–27.
- [57] Benzerga A, Besson J, Pineau A. Coalescence-controlled anisotropic ductile fracture. *J Engng Mat Technology* 1999;121:221–9.
- [58] Pardoën T, Hutchinson J. An extended model for void growth and coalescence. *J Mech Phys Solids* 2000;48(12):2467–512.
- [59] Cottrell A. Theory of brittle fracture in steels and similar metals. *Trans Metall Soc AIME* 1958;212:192–203.
- [60] Stroh A. A theory of the fracture of metals. *Adv Phys* 1957;6:517.
- [61] Zhang X, Armstrong R, Irwin G. Cleavage fracturing stages at micrometre-size inclusions in pressure vessel steel weld metal. *J Mat Sci Lett* 1986;5:961–4.
- [62] Tweed J, Knott J. Effect of reheating on microstructural and toughness of C–Mn weld metal. *Met Sci* 1983;17:45–54.
- [63] Lambert A, Garat X, Sturel T, Gourgues A, Gingell A. Application of acoustic emission to the study of cleavage fracture mechanism in a HSLA steel. *Scripta Mater* 2000;43:161–6.
- [64] Margolin B, Shvetsova V, Karzov G. Brittle fracture of nuclear pressure vessel steels—i. Local criterion for cleavage fracture. *Int J Pres Ves Piping* 1997;72:73–87.
- [65] Margolin B, Karzov G, Shvetsova V. Brittle fracture of nuclear pressure vessel steels—ii. Prediction of fracture toughness. *Int J Pres Ves Piping* 1997;72:89–96.
- [66] Karlik M, Nebdal I, Siegl J. Microstructure of a reactor pressure vessel steel close to the zones of ductile tearing and cleavage. *Mater Sci Engng A* 2003;357:423–8.
- [67] Chu C, Needleman A. Void nucleation effects in biaxially stretched sheets. *J Engng Mater Technol* 1980;102:249–56.

- [68] Mathur K, Needleman A, Tvergaard V. Ductile failure analyses on massively parallel computers. *Comput Meth Appl Mech Engng* 1994;119:283–309.
- [69] Narasimhan R, Rosakis A, Moran B. A three-dimensional numerical investigation of fracture initiation by ductile failure mechanism in a 4340 steel. *Int J Fract* 1992;56:1–24.
- [70] Brocks W, Sun D, Hömig A. Verification of the transferability of micromechanical parameters by cell model calculations with visco-plastic materials. *Int J Plast* 1995;11(8):971–89.
- [71] Fisher J, Gurland J. Void nucleation in spheroidized carbon steels. Part 1: Experimental. *Met Sci* 1981;15:185–92.

Available online at www.sciencedirect.com

Engineering Fracture Mechanics 72 (2005) 413–434

**Engineering
Fracture
Mechanics**www.elsevier.com/locate/engfracmech

Ductile to brittle transition of an A508 steel characterized by Charpy impact test Part II: modeling of the Charpy transition curve

B. Tanguy *, J. Besson, R. Piques, A. Pineau

Ecole des Mines de Paris, Centre des Matériaux, UMR CNRS 7633, BP 87, Evry Cedex, 91003, France

Received 11 August 2003; received in revised form 2 March 2004; accepted 23 March 2004

Available online 12 May 2004

Abstract

A finite element simulation of the Charpy test is developed in order to model the ductile to brittle transition curve of a pressure vessel steel. The material (an A508 steel) and the experimental results are presented in a companion paper (Part I [Engng. Fract. Mech.]).

The proposed simulation includes a detailed description of the material viscoplastic behavior over a wide temperature range. Ductile behavior is modeled using modified Rousselier model. The Beremin model is used to describe brittle fracture. The Charpy test is simulated using a full 3D mesh and accounting for adiabatic heating and contact between the specimen, the striker and the anvil.

The developed model is well suited to represent ductile tearing. Using brittle failure parameters identified below $-150\text{ }^{\circ}\text{C}$, it is possible to represent the transition curve up to $-80\text{ }^{\circ}\text{C}$ assuming that the Beremin stress parameter σ_u is independent of temperature. Above this temperature, a temperature dependent Beremin stress parameter, σ_u , must be used to correctly simulate the transition curve. Quasi-static and dynamic tests can then be consistently modeled.

© 2004 Elsevier Ltd. All rights reserved.

Keywords: Ductile to brittle transition; Charpy test; Local approach to fracture; Finite element simulation

1. Introduction

Charpy V-notch impact tests are still widely used to study the fracture properties of steels. This test was first proposed more than a century ago [2,3]. The test is simple to perform and has been widely used since then. This testing mode was initially used to determine macroscopic characteristics such as the Charpy fracture energy CVN. Instrumented Charpy devices are now used which allow to measure the whole force–displacement curve from which more information can be gained. However these data are

* Corresponding author. Tel.: +33-1-60-76-30-61; fax: +33-1-60-76-31-50.

E-mail address: benoit.tanguy@ensmp.fr (B. Tanguy).

Nomenclature

| | |
|---|---|
| A_n | nucleation law material parameter |
| C_p | volume heat capacity of the damaged material (MPa K ⁻¹) |
| C_p^0 | volume heat capacity of the undamaged material (MPa K ⁻¹) |
| $\underline{\underline{C}}$ | elastic fourth-order tensor |
| $\underline{\underline{D}}$ | heat diffusivity (m ² s ⁻¹) |
| \mathbf{F} | viscoplastic flow function |
| F | load |
| K_i, n_i | viscoplastic law material coefficients |
| P_R | total failure probability |
| Q_1, Q_2, b_1, b_2 | plastic hardening parameters |
| $R(p, T)$ | flow stress dependent on cumulative plastic strain and temperature (MPa) |
| R_0 | quasi-static yield stress (MPa) |
| TK_7 | temperature index corresponding to 70 J/cm ² (56 J) for a standard V-notch Charpy specimen |
| V_0 | reference volume |
| f | void volume fraction |
| f_0 | initial void volume fraction |
| h_\perp | mesh size in the direction perpendicular to the crack plane |
| h_i | mesh size along the propagation direction |
| h_t | mesh size tangent to the crack front |
| m | exponent of the Weibull distribution |
| p | equivalent plastic strain of undamaged material (s ⁻¹) |
| p_c | critical strain over which cleavage can occur |
| q_R, D_R | modified Rousselier model parameters |
| x_D | diffusion length |
| δ | specimen deflexion |
| $\dot{\epsilon}$ | strain rate (s ⁻¹) |
| $\dot{\underline{\underline{\epsilon}}}$ | strain rate tensor |
| $\dot{\underline{\underline{\epsilon}}}_e$ | elastic strain rate tensor |
| $\dot{\underline{\underline{\epsilon}}}_p$ | plastic strain rate tensor |
| $\dot{\underline{\underline{\epsilon}}}_{th}$ | thermal strain tensor |
| ϕ | viscoplastic yield surface of the porous material |
| σ | tensile stress (MPa) |
| σ_\star | effective stress (MPa) |
| $\underline{\underline{\sigma}}$ | macroscopic Cauchy stress |
| σ_{eq} | von Mises equivalent stress |
| σ_{kk} | trace of the stress tensor |
| σ_1 | maximum principal stress of $\underline{\underline{\sigma}}$ |
| σ_{1p} | local effective stress for brittle failure |
| σ_u | brittle failure model parameter |
| σ_w | Weibull stress |
| Δa_{max} | maximum crack advance measured at the center of the specimen |

representative of the material and of the specimen so that it remains difficult to transfer these data to actual large structures.

In this paper, a micromechanical analysis of the Charpy test is proposed. The aim is to determine model parameters which are intrinsic to the material. The parameters are then used to simulate the Charpy test so that macroscopic characteristics can be predicted and compared to actual tests in order to validate the model. This strategy allows one to transfer the results of the tests to larger structures with an increased level of confidence.

The first numerical simulation of the Charpy test was proposed by Norris [4] using plane strain conditions. Effects of material rate sensitivity [5], of temperature dependence [6], of the 3D geometry [7,8] and of specimen size [9] were studied in a series of theoretical papers lacking of comparisons with experiments. Such comparisons were carried out by other authors for steels similar to the material investigated in the present study [10,13]. Simulations of subsize Charpy specimens were also proposed in [14].

The material used in the present study is fully described in a companion paper [1]. This steel (A508 Cl.3) is used to manufacture the pressure vessel of French nuclear pressurized water reactors. The aging behavior of this material under irradiation is monitored using Charpy V-notch specimens located in capsules inside the pressure vessel. The present work aims at proposing a computational strategy what could ultimately be used to predict the fracture toughness of irradiated materials from Charpy data.

The paper details the material models needed for the simulation of the ductile to brittle transition (DBT). They include the description of: (i) the viscoplastic behavior over a wide temperature range, (ii) ductile tearing and (iii) brittle failure. The numerical procedures are then described together with the identification of the material parameters. Results of the simulation of ductile crack extension and subsequent brittle failure are finally presented which allow the simulation of the whole Charpy transition curve for an unirradiated material.

2. Material models

This study was performed on an A508 (16MND5) steel presented in the companion paper [1]. In this section, the different material models needed to simulate the Charpy test are detailed. This includes: (i) the viscoplastic behavior of the undamaged material, (ii) the ductile damage behavior and (iii) a criterion to describe the initiation of brittle failure.

2.1. Viscoplastic behavior

Ductile damage in the material is mainly initiated on MnS inclusions whose volume fraction, given by the Franklin formula [15] as well as image analysis, is equal to 1.75×10^{-4} . As the interface between these inclusions and the surrounding matrix is very weak, the MnS volume fraction can be considered as the initial porosity used in the model for ductile fracture. Further void nucleation may occur on iron carbides (Fe_3C) for high levels of deformation as shown in [1]. One consequence of the low initial porosity is that coupling between work hardening and void growth can be neglected during tensile tests. These tests can therefore be directly used to identify the viscoplastic behavior of the undamaged material in the transition temperature range.

Experiments conducted at various temperatures ($T \in [-196 \text{ }^\circ\text{C}, 200 \text{ }^\circ\text{C}]$) and strain rates ($\dot{\epsilon} \in [10^{-4} \text{ s}^{-1}, 5 \times 10^3 \text{ s}^{-1}]$) are detailed elsewhere [1,16]. This included quasi-static tensile tests as well as dynamic tests using Hopkinson split bars. The main results are summarized as follows.

The flow stress of the material is expressed as a function of temperature and plastic strain, p , as

$$R(p, T) = R_0 + Q_1(1 - \exp(-b_1 p)) + Q_2(1 - \exp(-b_2 p)) \quad (1)$$

where R_0 , Q_1 and b_1 depend on T where Q_1 and b_2 are chosen constant. The equivalent plastic strain rate \dot{p} is given by the viscoplastic flow function $\dot{p} = \mathbf{F}(\sigma - R)$ which is expressed as

$$\frac{1}{\dot{p}} = \frac{1}{\mathbf{F}} = \frac{1}{\dot{\epsilon}_1} + \frac{1}{\dot{\epsilon}_2} \quad \text{with } \dot{\epsilon}_i = \left\langle \frac{\sigma - R}{K_i} \right\rangle^{n_i} \quad i = 1, 2 \quad (2)$$

where σ is the tensile stress. The strain rates $\dot{\epsilon}_1$ and $\dot{\epsilon}_2$ are each representative of a deformation mechanism: (1) Peierls friction, (2) phonon drag [17]. The mechanism with the smallest deformation rate controls deformation. In practice, the phonon drag mechanism only prevails at very high strain rates ($>1000 \text{ s}^{-1}$). In Eq. (1), K_1 and n_1 are temperature-dependent whereas K_2 and n_2 are constant.

Adjusted model parameters for plastic hardening and strain rate effects are given in Fig. 1. Fig. 2 shows that these parameters lead to a good agreement between the experimental conventional yield stress (R_0) with the predicted one values. The good agreement is observed over the whole experimental strain rate and temperature ranges which were investigated, as already shown in [1].

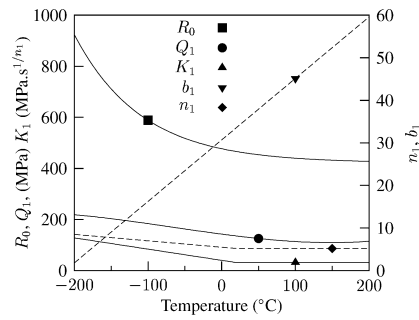


Fig. 1. Material coefficients R_0 , Q_1 , b_1 , K_1 and n_1 as functions of the temperature. Other coefficients are constant and equal to: $Q_2 = 472 \text{ MPa}$, $b_2 = 1.7$, $K_2 = 0.18 \text{ MPa s}^{1/n_2}$, $n_2 = 1.1$.

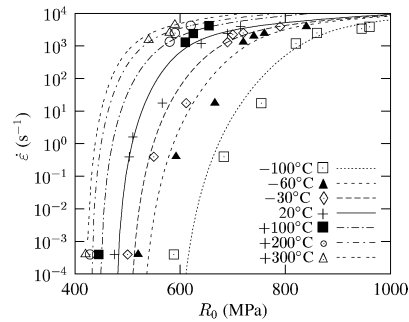


Fig. 2. Variation of the yield stress as a function of strain rate for different temperatures (lines: model, points: experiments).

2.2. Ductile failure

Ductile failure is commonly represented by models using a single damage parameter which represents the void volume fraction or porosity, f [18,19]. The Gurson model extended by Tvergaard and Needleman [18] (so called GTN model) is based on micromechanical considerations and is commonly used. The Rousselier [19] model is based on thermodynamics [20,21]. However the original formulation of this model is not suitable for temperature and rate dependent materials as shown in [22]. To overcome these difficulties, a modified Rousselier model was proposed in [22,23]. This modified Rousselier model will be used in the following. All models assume an additive decomposition of the strain rate tensor $\dot{\underline{\underline{\epsilon}}}$ as

$$\dot{\underline{\underline{\epsilon}}} = \dot{\underline{\underline{\epsilon}}}_e + \dot{\underline{\underline{\epsilon}}}_p + \dot{\underline{\underline{\epsilon}}}_{th} \quad (3)$$

where $\underline{\underline{\epsilon}}_e$ is the elastic strain tensor, $\underline{\underline{\epsilon}}_p$ the plastic strain tensor and $\underline{\underline{\epsilon}}_{th}$ the thermal strain tensor. The elastic strain tensor is related to the stress tensor $\underline{\underline{\sigma}}$ by the Hooke's law: $\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{\mathbf{C}}} : \underline{\underline{\epsilon}}_e$ where $\underline{\underline{\mathbf{C}}}$ is the elastic fourth-order tensor. The dependence of the elastic properties on damage is neglected as in many other studies devoted to ductile rupture. Thermal expansion (caused by adiabatic heating) can also be neglected as it occurs only in areas where plastic strain is very large.

The model is based on the implicit definition of an effective stress (σ_\star) which is a function of both the macroscopic Cauchy stress ($\underline{\underline{\sigma}}$) and the porosity

$$\frac{\sigma_{eq}}{(1-f)\sigma_\star} + \frac{2}{3}fD_R \exp\left(\frac{q_R}{2} \frac{\sigma_{kk}}{(1-f)\sigma_\star}\right) - 1 \stackrel{\text{def.}}{=} \sigma_\star^0 \quad (4)$$

where σ_{eq} is the von Mises equivalent stress and σ_{kk} the trace of the stress tensor, while q_R and D_R are material parameters which need to be adjusted.

The viscoplastic yield function is written as

$$\phi = \sigma_\star - R(p) \quad (5)$$

Viscoplastic flow occurs when $\phi \geq 0$. The flow stress R is given by Eq. (1) as a function of the effective plastic strain, p . The plastic strain rate tensor is given by the normality rule as

$$\dot{\underline{\underline{\epsilon}}}_p = (1-f)\dot{p} \frac{\partial \phi}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} = (1-f)\dot{p} \frac{\partial \sigma_\star}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} \quad (6)$$

Noting that σ_\star is an homogeneous differentiable function of $\underline{\underline{\sigma}}$ of degree 1, Euler's theorem applies so that: $(\partial \sigma_\star / \partial \underline{\underline{\sigma}}) : \underline{\underline{\sigma}} = \sigma_\star$. Consequently one obtains

$$\dot{\underline{\underline{\epsilon}}}_p : \underline{\underline{\sigma}} = (1-f)\dot{p}\sigma_\star \quad (7)$$

This corresponds to the fact that the macroscopic plastic work (left-hand side) is equal to the microscopic one (right-hand side) [24]. The multiplier \dot{p} is given by Eq. (2) as $\dot{p} = \mathbf{F}(\sigma_\star - R)$. The evolution of the damage variable is governed by mass conservation modified to account for nucleation of new voids [18,25]

$$\dot{f} = (1-f)\text{trace}(\dot{\underline{\underline{\epsilon}}}_p) + A_n \dot{p} \quad (8)$$

In this expression, the first right-hand side term corresponds to void growth and the second one to strain controlled nucleation. A_n is a material parameter representing the nucleation rate [26]. All model parameter directly related to ductile fracture (i.e. q_R , D_R and A_n) are assumed to be temperature independent.

Under quasi-static loading, isothermal conditions are assumed. Under rapid loading corresponding to adiabatic conditions, the temperature T increases due to plastic deformation. In the following, the temperature evolution is written as

$$C_p \dot{T} = \beta \dot{\underline{\underline{\epsilon}}}_p : \underline{\underline{\sigma}} = (1-f)\beta \dot{p}\sigma_\star \quad (9)$$

where C_p is the volume heat capacity and β a constant factor. Note that C_p equals $(1-f)C_p^0$ where C_p^0 is the heat capacity of the undamaged material so that $C_p^0 \dot{T} = \beta \dot{p} \sigma_*$. The value of C_p^0 was obtained from the literature [27].

2.3. Brittle failure

Brittle fracture is described using the Beremin model [28] which accounts for the random nature of brittle fracture. The model is based on the Weibull weakest link theory. The model uses the following definition of a local effective stress for brittle failure σ_{ip}

$$\sigma_{ip} = \begin{cases} \sigma_1 \exp(-p/k) & \text{if } \dot{p} > 0, p > p_c \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (10)$$

where σ_1 is the maximum principal stress of $\underline{\sigma}$. The condition $\dot{p} > 0$ expresses the fact that failure can only occur when plastic deformation occurs. The $\exp(-p/k)$ term has been proposed in [28] to phenomenologically account for grain shape changes or crack blunting effect induced by plastic deformation. p_c is the critical strain over which cleavage can occur. This brittle failure model can be applied as a postprocessor of calculations including ductile tearing. In this case, care must be taken while computing the failure probability as ductile crack advance leads to unloading of the material left behind the crack front. Considering that each material point is subjected to a load history, $\underline{\sigma}(t)$, $p(t)$ (t = time) the probability of survival of each point at time t is determined by the maximum load level in the time interval $[0, t]$. An effective failure stress $\tilde{\sigma}_{ip}$ is then defined as [29,30]

$$\tilde{\sigma}_{ip}(t) = \max_{t' \in [0, t]} \sigma_{ip}(t') \quad (11)$$

The failure probability, P_R , is obtained by computing the Weibull stress, σ_w

$$\sigma_w = \left[\int_V \frac{\tilde{\sigma}_{ip}^m}{V_0} dV \right]^{1/m} \quad P_R = 1 - \exp \left[- \left(\frac{\sigma_w}{\sigma_u} \right)^m \right] \quad (12)$$

where the volume integral is taken over the whole volume of the specimen. V_0 is a reference volume which can be arbitrarily fixed. Model parameters (σ_u, m, k, p_c) must be adjusted. They were considered as constant as in the original Beremin model.

3. Numerical simulation

The model for ductile rupture has been implemented in a general purpose implicit finite element code [31]. An implicit scheme is used to integrate the constitutive equations. The consistent tangent matrix is computed using the method proposed in [32]. Details of the implementation can be found in [23]. Finite strains are treated using a corotational reference frame [33,34] defined so that the stress rate corresponds to the Jauman rate.

Depending on the geometry different element types were used. This includes plane strain (PE) elements used to model the Charpy test in a simplified way (Section 6), axisymmetric (AXI) elements used to model round notched bars and 3D elements used to model the Charpy tests. In all cases except in the contact zones in 3D cases where linear elements (i.e. 8 nodes bricks) have been used, calculations are done using quadratic elements with reduced integration. In regions where the crack propagates, 8 nodes (PE and AXI) and 20 nodes (3D) elements are used. The contact between the Charpy sample and the striker and the anvil was modeled using Coulomb friction with a friction coefficient equal to 0.1. The elements in the contact regions are linear elements in the case of 3D simulations. To join the regions, nodes belonging to quadratic elements

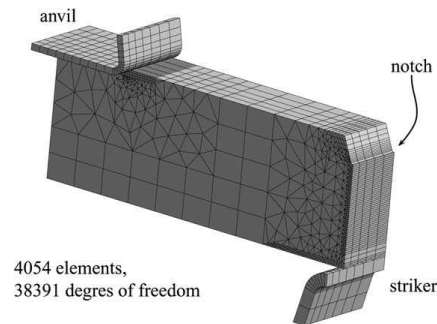


Fig. 3. Finite element mesh used for the analysis.

and lying at the middle of an edge between a quadratic and a linear element are constrained so that they remain at the middle of the edge.

The finite element mesh used to simulate the Charpy specimen is shown in Fig. 3. Only $\frac{1}{4}$ of the specimen is meshed due to symmetries. The specimen, striker and anvil sizes and geometries are those of the AFNOR standard [35].

Tests under dynamic conditions (striker speed $v_0 = 5 \text{ m s}^{-1}$) and quasi-static conditions (striker speed $v_0 = 1 \text{ } \mu\text{m s}^{-1}$) corresponding to those of the companion paper [1] were simulated. Inertial effects are not accounted for in both cases as they were shown to affect failure only at very low temperatures and not in the transition regime [6,36,37]. Dynamic tests were simulated using adiabatic heating conditions as discussed in [1]. Quasi-static tests were simulated under isothermal conditions.

Once the porosity has reached f_c at a given Gauss point, this Gauss point is considered as “broken”. In that case, the behavior is replaced by an elastic behavior with a very low stiffness (Young’s modulus: 1 MPa). Once a sufficiently high number of Gauss points are broken (4 for 20 nodes bricks, 2 for 8 nodes quadrangles), the element is automatically removed by checking this condition after global convergence for each time increment (therefore the elements are removed in an explicit way).

In the case of brittle fracture, the volume integral in Eq. (12) is evaluated using a standard Gauss quadrature. Before computing the maximum principal stress, σ_1 , the stress tensor is smoothed in order to obtain a constant stress tensor trace in each element. At each Gauss point, the computed stress tensor $\underline{\sigma}$ therefore is replaced by the following tensor: $\underline{\sigma}' = \underline{\sigma} - \frac{1}{3}(\sigma_{kk} - \langle \sigma_{kk} \rangle)\mathbf{1}$ where $\mathbf{1}$ where is the unity tensor and $\langle \sigma_{kk} \rangle$ the mean stress trace in the element (computed using the Gauss quadrature). This smoothing procedure differs from the one proposed by ESIS [38] which recommends to compute the Weibull stress using the average stress tensor for each element. The present procedure allows to smooth the pressure variations caused by the quasi-incompressibility of the material (for low levels of porosity) while preserving a more accurate stress profile. In any case, differences between both procedures remain very limited.

4. Adjustment of the material parameters

The identification of material parameters relative to the viscoplastic behavior is relatively straightforward as tests can be performed on simple specimens in which stress and strain can be considered as uniform. This is not the case in the case of ductile and brittle rupture. The identification procedure is then based on the comparison between the experimental response of a small structure and the simulated one. This simulation must be performed using finite element simulation.

Table 1
Adjusted model parameters

| | | |
|--------------------|--------------------------|---|
| Elastic properties | Young's modulus E | 210 GPa |
| | Poisson's ratio ν | 0.3 |
| Plastic hardening | $R_0(T), Q_1(T), b_1(T)$ | see Fig. 1 |
| | Q_2, b_2 | 472 MPa, 1.7 |
| Strain rate effect | $K_1(T), n_1(T)$ | see Fig. 1 |
| | K_2, n_2 | 0.18 MPa s ^{1/n₂} , 1.1 |
| Rousselier model | f_0 | 1.75×10^{-4} |
| | q_R, D_R, f_c | 0.89, 2.2, 0.4 |
| | A_n | 0.038 for $0.5 \leq p \leq 1.1$ |
| Beremin model | V_0, σ_u | $0.001 \text{ mm}^3, 2925 \text{ MPa}$ |
| | m, k, p_c | 17.8, 4, 10^{-4} |
| Mesh size | h_{\perp} | 100 μm |
| | h_l, h_t (3D) | 150, 800–1200 μm |
| Adiabatic heating | β | 0.9 |
| | C_p^0 | 3.2 MPa s^{-1} |

In order to simplify the identification procedure, the ductile and brittle rupture models are identified at temperatures where a single failure mechanism is active. Brittle rupture was identified for $T \in [-196 \text{ }^\circ\text{C}, -150 \text{ }^\circ\text{C}]$ and ductile rupture for $T = 20 \text{ }^\circ\text{C}$ (see Fig. 3 in [1]). Fitted parameters are assumed to remain constant over the whole investigated temperature range $T \in [-196 \text{ }^\circ\text{C}, 200 \text{ }^\circ\text{C}]$. The validity of the assumption is discussed in Section 5.2. On the other hand, parameters describing hardening and strain rate dependence are temperature dependent (Section 2.1). Adjusted parameters are gathered in Table 1.

4.1. Ductile failure

Axisymmetric notched bars [39,40] are used to identify the Rousselier model. These are small structures which can be rapidly computed as many simulations with different sets of parameters are required by the identification algorithms. Different notch radii are used: $\rho = 6.0, 2.4$ and 1.2 mm for a minimum sample diameter Φ_0 equal to 6.0 mm (Fig. 4(a)). Tests are performed measuring the minimum diameter variation as explained in [1]. In these samples, the values of the stress triaxiality ratio ($\frac{1}{3}\sigma_{kk}/\sigma_{eq}$), which plays an important role in ductile fracture, are close to those encountered in Charpy specimens. In order to obtain a parameter identification representative of ductile crack extension, it is necessary to include in the experimental data base tests where stable crack growth is obtained. This can be done by conducting the tests on notched bars with a controlled diameter variation rate. With a standard axial displacement control, the test usually becomes unstable after crack initiation so that the rapid load drop (Fig. 4(a)), which corresponds to crack growth, cannot be monitored.

As the model parameters are numerous, it is desirable to obtain some of them directly from the metallurgical analysis of the material [41,42]. In the present case, the initial porosity is set equal to the MnS volume fraction (i.e. $f_0 = 1.75 \times 10^{-4}$). Cross-section examinations of notched bars and Charpy specimen, show that secondary voids are nucleated on cemented particles (Fe_3C) at high levels of plastic strain. Nucleation starts for $p \approx 0.5$ [1]. The carbide volume fraction is obtained from the chemical composition of the material: 2.3%. This sets the maximum value of the nucleated porosity. Nucleation is assumed to end for $p \approx 1.1$ which is the level of plastic deformation in a tensile bar close to the rupture surface. Consequently the nucleation rate parameter A_n (Eq. (8)) is set to 0.038 for $0.5 \leq p \leq 1.1$ and to 0.0 otherwise. It can be noted that secondary nucleation plays a limited role in notched bars but that it must be accounted for in the case of Charpy specimen in order to correctly model crack initiation at the root of the notch and crack extension at the free surfaces of the samples. It should also be noted that the nucleation law used in

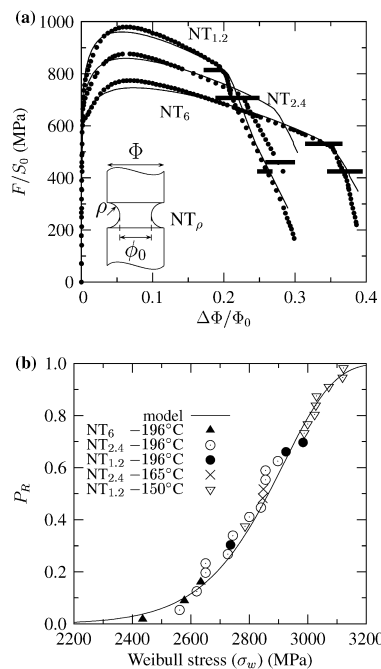


Fig. 4. Identification of the model parameters on notched axisymmetric bars ($\Phi_0 = 6$ mm, $\Phi = 10.8$ mm, $r = 1.2, 2.4, 6$ mm): (a) ductile rupture (line: model; dots: experiment), horizontal thick bars indicate experimental scatter and (b) brittle rupture.

this study strongly differs from the one used by other authors for similar materials [12,43]. In these cases, the phenomenological law proposed in [25] was used with material parameters such that nucleation is almost exhausted for $p = 0.5$, which is not in agreement with the observations reported in [44].

Mesh size and mesh design play an important role in calculations involving the simulation of crack initiation and propagation [19,45–47]. Due to the softening behavior of the material, mesh size influences the fracture energy and it is often argued that this quantity should be adjusted on experiments involving stable crack growth in order to fit the crack propagation energy [19,48]. The mesh size is then interpreted as some microstructural characteristic length (e.g. interparticle spacing or grain size). Experiments on nodular cast iron having the same volume fraction of nodules but different sizes support this interpretation as it was shown that ductility decreases with decreasing interparticle spacing and that this effect can be modeled using finite element sizes proportional to particle spacing [49].

The element size is characterized by three quantities [50]: h_\perp the mesh size in the direction perpendicular to the crack plane, h_l the mesh size along the propagation direction and h_t the mesh size tangent to the crack front (see Fig. 5). h_\perp plays the most significant role on crack propagation. It should be considered as the material parameter to be adjusted. h_l must be of the same order of magnitude as h_\perp in order to consistently capture the stress–strain fields in the propagation direction. In particular it must be small enough to capture the stress maximum which develops ahead of the notch root so that brittle fracture can be correctly

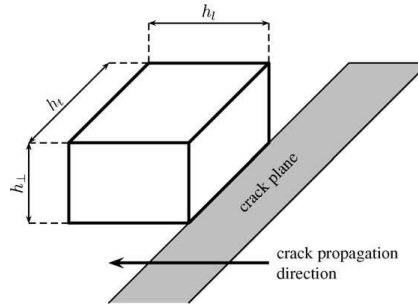


Fig. 5. Mesh design along the crack path.

modeled. Finally h_t is used to describe the gradients along the thickness of the specimen. For this reason, h_t is usually smaller at the free boundaries. The values of these mesh size parameters are given in Table 1. The value of $100\ \mu\text{m}$ retained for h_{\perp} corresponds roughly to the mean distance between MnS inclusions.

4.2. Brittle failure

Model parameters (σ_u , m and k) are first identified using tensile round notched bars (NT) tested at low temperature [$-196\ ^{\circ}\text{C}$, $-150\ ^{\circ}\text{C}$] in order to deal with brittle fracture only. Twenty-eight tests were performed. The parameters are identified using an automatic identification procedure which minimizes the quadratic difference between the theoretical and experimental failure probabilities. For a given set of model parameters, the Weibull stress at experimental failure and the associated theoretical failure probability (Eq. (12)) are computed for each sample. Using the same Weibull stress, the different tests are ordered (increasing Weibull stress) to compute the experimental failure probability as: $P_R^i = (1 - \frac{1}{2})/N$ where N is the total number of specimens and $i = 1, \dots, N$ the rank of the specimen.

The reference volume, V_0 , is taken equal to $0.001\ \text{mm}^3$. The values of σ_u and m were identified for $k = 0, 2, 4$ (see Eq. (10)). The best fit was obtained with $k = 4$. Note however that the influence of k is small as plastic deformation remains limited in the brittle failure temperature range (see Fig. 3 in [1]). Experimental and theoretical failure probabilities are compared in Fig. 4(b) as a function of the computed Weibull stress. In this figure, a good agreement between experimental and theoretical values is observed when adopting the following values for the Weibull parameters: $m = 17.8$ and $\sigma_u = 2925\ \text{MPa}$. These values are typical of those found in other studies devoted to cleavage fracture of A508 steels (see e.g. [28]).

5. Results of Charpy V-test simulation

5.1. Simulation of ductile tearing

Simulated load–striker displacement curves are compared with experiments in Fig. 6 for dynamic ¹ tests and in Fig. 7 for quasi-static tests. The effects of test temperature and striker speed are well reproduced after significant displacement has been applied. The load decrease caused by crack growth is also reproduced.

¹ In this paper dynamic means at high speed ($v_0 = 5\ \text{m s}^{-1}$) without taking into account the inertial effects.

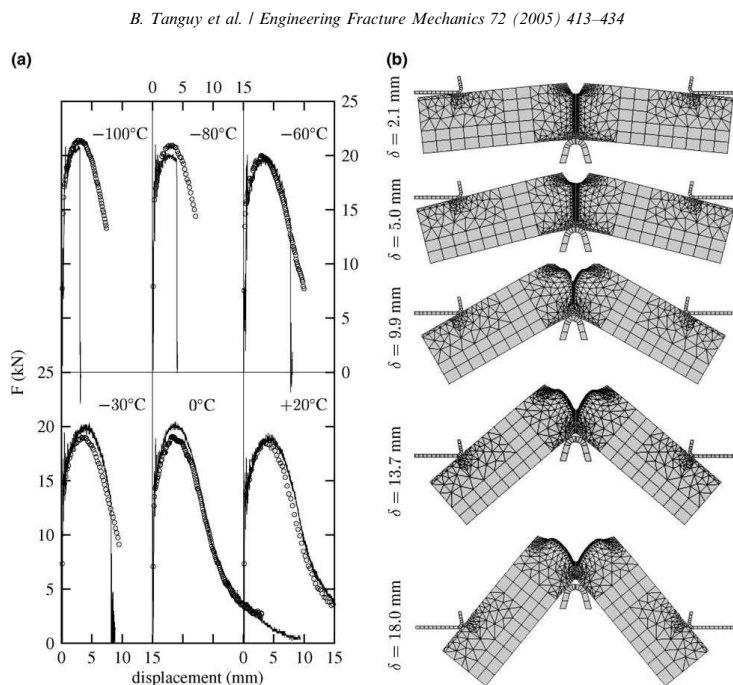


Fig. 6. (a) Comparison of computed (dots) and experimental (lines) load–displacement curves for the dynamic Charpy test at different temperatures and (b) deformed Charpy specimen at 20 °C for different values of the striker displacement δ .

Load–displacement curves at $T = -60$ °C and $T = 20$ °C computed using quasi-static, dynamic with adiabatic heating and dynamic with constant temperature are compared in Fig. 8(a). It can be noted that the isothermal dynamic simulation results in much higher forces than the adiabatic one and overestimates the actual experimental data. On the other hand, under quasi-static conditions, isothermal calculations appear to be adequate. Fig. 8(b) compares the energy–crack advance curves obtained using the three previous hypothesis. In this figure, Δa_{\max} represents the maximum crack advance which is measured at the center of the specimen. Experimental data at $T = -60$ °C were obtained from the examination of the fracture surfaces where the transition between ductile crack growth and brittle fracture could easily be observed. In this figure it is noted that a dynamic calculation with constant temperature largely overestimates the Charpy energy for a given crack advance. This result is a direct consequence of the load overestimation for a given displacement. With a more realistic assumption corresponding to adiabatic heating, a good agreement is found between tests and simulation. In particular, the slightly smaller energy needed to propagate a crack under quasi-static conditions is well reproduced at -60 °C. This effect can easily be explained by the temperature effect on the constitutive laws of the material. At temperatures above 0 °C, the ductile upper shelf energy (USE) is computed accurately provided that the calculation is carried out for deflection as large as 18 mm. Comparison with experiments are shown in Fig. 12(b) and (d). Some experimental dispersion on the USE can be observed which has been related to material heterogeneities [41,51].

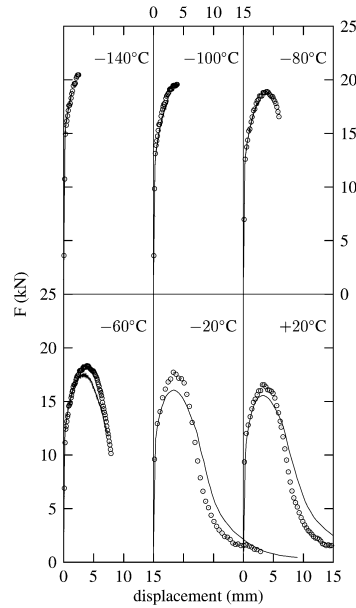


Fig. 7. Comparison of computed (dots) and experimental (lines) force–displacement curves for the quasi-static Charpy tests at different temperatures.

Opening stresses ahead of the crack tip at the center of the Charpy specimen are plotted in Fig. 9 for a maximum crack advance, Δa_{\max} , of 1.0 and 2.0 mm at $T = -60$ °C. The smallest stress maximum is obtained for quasi-static conditions while the highest value corresponds to dynamic/isothermal conditions. It is also shown that the stress maximum is located at about 1.0 mm for the crack tip under quasi-static conditions and only at about 500 μm otherwise. These results show that the mesh size used along the propagation direction $h_l = 150$ μm is large enough to capture the stress field. Stresses tend to slightly increase with increasing crack length. It was noted that the opposite effect is obtained when the crack length is about 4.0 mm because the crack tip is closer to the free surface as this causes a strong constraint loss.

Fig. 10(b) shows crack advance and the crack front shape for $\Delta a_{\max} = 1.0$ mm (CVN = 97 J) and $\Delta a_{\max} = 3.6$ mm (CVN = 157 J). The simulation compares well with experiments (Fig. 10(a)): (i) tunneling effect is observed as the crack length is higher at the center of the specimen, (ii) the stress maximum is located at the center of the specimen ahead of the crack tip; this result is in agreement with the position of observed cleavage initiation sites [1]; (iii) the specimen width reduction is well simulated. Note however that slanted shear lips are not reproduced. It is also interesting to note that for large deflections ($\delta > 7.5$ mm) the contact line between the striker and the specimen is no longer located on the plane of symmetry as observed experimentally.

Fig. 11 represents the temperature increase, ΔT , at the center of the specimen ahead of the notch tip for two crack advances (2.0 and 3.6 mm). It is shown that the temperature rise is maximum (350 °C) at the notch tip; this is caused by the larger plastic strain needed to reach failure as the stress triaxiality is smaller

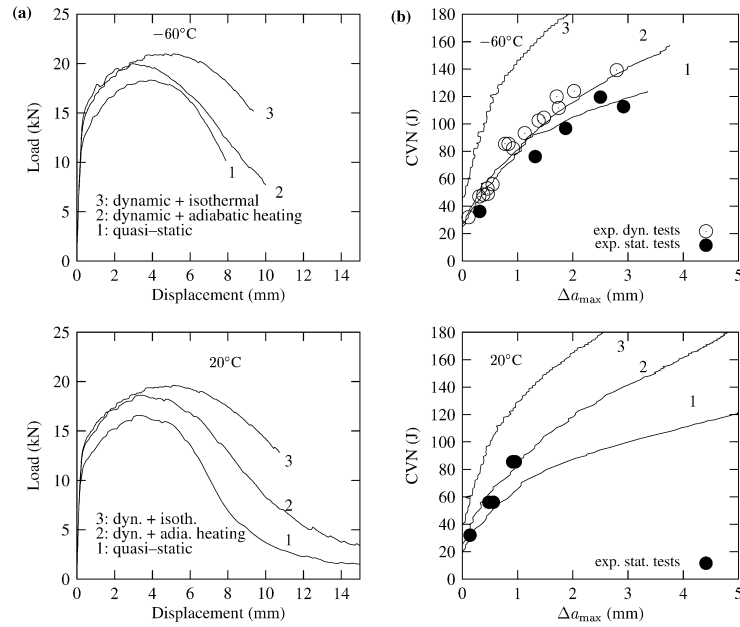


Fig. 8. Comparison of computations carried out using different conditions (static/dynamic, isothermal/adiabatic): (a) load–displacement curves and (b) energy–crack advance curves; dots represent data obtained using low blow tests. Data points are taken from [1].

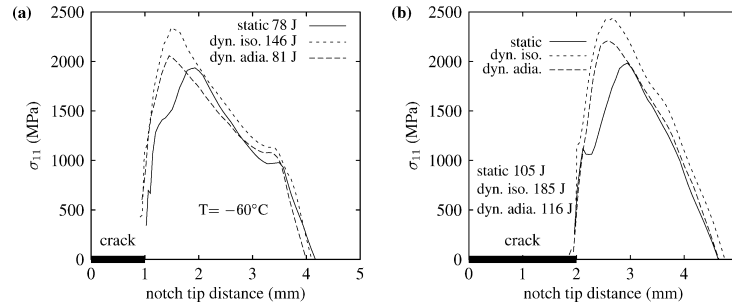


Fig. 9. Stress ahead of the crack tip for $\Delta a_{\text{max}} = 1 \text{ mm}$ (a) and $\Delta a_{\text{max}} = 2 \text{ mm}$ (b) assuming quasi-static, dynamic isothermal and dynamic adiabatic conditions. Figures indicate the energy (CVN) reached in the simulation. $T = -60^{\circ}\text{C}$.

close to a free surface. Ahead of this zone, the temperature increase at failure lies between 200 and 250 °C. The side opposite to the notch is initially plastically deformed under compression. This leads to a temperature increase which occurs well before this part is actually cracked: this may possibly cause brittle

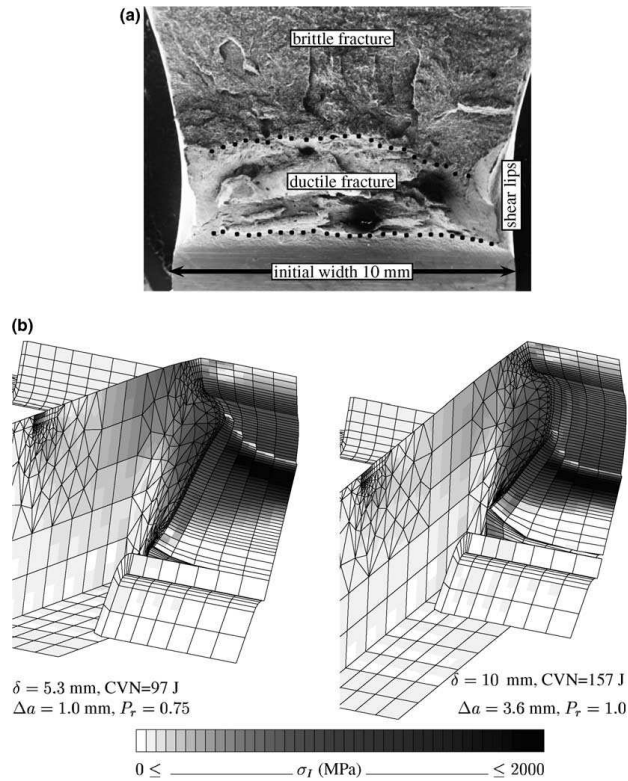


Fig. 10. Fracture at $T = -60$ °C under dynamic conditions: (a) experimental fracture surface and (b) simulation of ductile crack propagation contour plots indicate σ_1 .

cracks to arrest in this zone. Comparisons with measurements made at the outer free surface of the specimen (Fig. 6 in [1]) shows that the simulation overestimates the experiments by a factor 2. On the one hand, this may be caused by experimental problems such as the rapid cooling of the thermocouple at the free surface or the difficulty to put the thermocouple at the location of maximum heat production. On the other hand, this may also be caused by the model itself as failure at the free surface occurs by the formation of shear lips which are not accounted for.

5.2. Results: modeling of the Charpy transition curve

In order to determine the Charpy transition curve, the previous calculations including ductile crack extension are postprocessed using the Beremin model with the material coefficients optimized in Section 4.2. The Charpy energy CVN corresponding to a failure probability of 10%, 50% and 90% is plotted as a

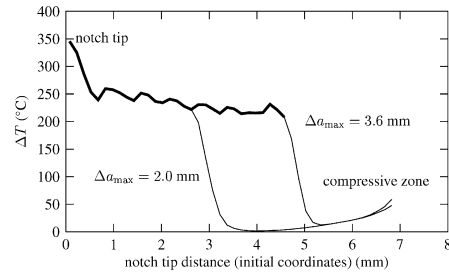


Fig. 11. Temperature increase as a function of the position at the center of the Charpy specimen after a crack advance equal to 2 and 3.6 mm. The position is given using the initial (undeformed) coordinates as broken elements are removed during the calculation. The thick line represents points for which the elements are broken.

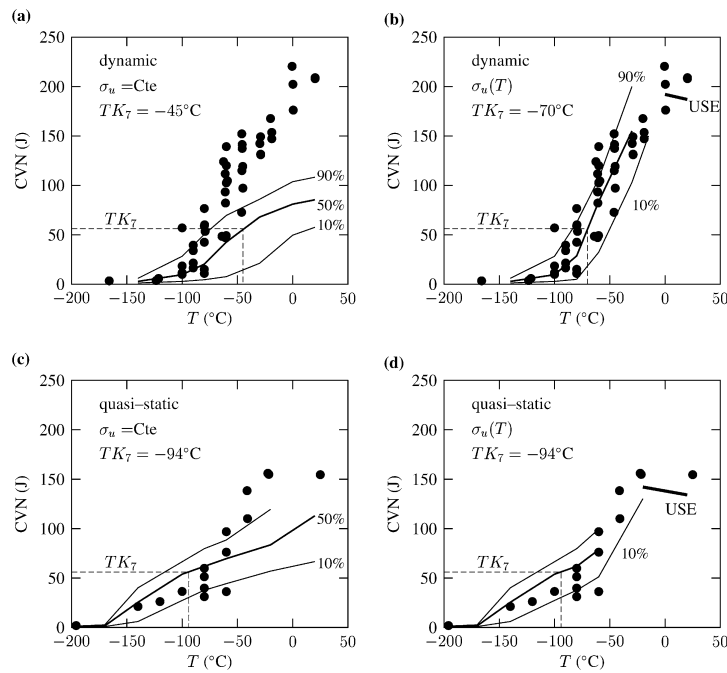


Fig. 12. Prediction of the Charpy transition curve under quasi-static and dynamic conditions assuming a constant value for σ_u and a temperature dependent σ_u (USE: ductile upper shelf energy).

function of the test temperature. Results are shown in Fig. 12(a) for dynamic adiabatic conditions and Fig. 12(c) for quasi-static conditions. It is shown that the prediction is satisfactory up to $T = -80$ °C but that,

above this temperature the model largely underestimates the rupture energies. This effect is more pronounced for dynamic tests than for quasi-static tests. This result is nevertheless important as the Weibull parameters were identified in the $[-196\text{ }^{\circ}\text{C}, -150\text{ }^{\circ}\text{C}]$ temperature range showing that data extrapolation is possible up to $-80\text{ }^{\circ}\text{C}$. Similar results have been reported in the literature [12,43]. Bernauer et al. [43] explained this result considering that void nucleation at carbides eliminates potential sites for cleavage. Therefore they proposed a modified version of the Beremin model to take into account the decrease of the potential defect population. This situation prevails only at high temperature where high plastic strains are needed to reach cleavage stresses. These authors used a nucleation law such that 50% of the carbides have nucleated void for a plastic strain equal to 0.3. This assumption cannot be applied to the present steel since it was experimentally observed that void nucleation at carbides initiates for plastic strains larger than 0.5 [1,52].

The transition curve was adjusted using a temperature dependent value for the σ_u parameter as already proposed in [29,30]. This is similar to using a temperature dependent critical cleavage stress as in [53–55]. In the case of dynamic tests, as the conventional Charpy V-notch test, the temperature increase ahead of the crack tip should not be neglected when using this solution. Calculations show that the temperature increase, when the stress maximum is reached, lies between 20 and 30 $^{\circ}\text{C}$, in first half of the specimen (i.e. $\Delta a_{\max} < 4.0\text{ mm}$). This temperature increase is even larger on the specimen side opposite to the notch as the crack propagates in a region which has been predeformed in compression. Consequently the brittle failure model accounting for load history (Section 2.3) must be slightly modified. The rupture probability of a volume element is no longer represented by σ_{1p} but by $\omega = (\sigma_{1p}/\sigma_u)^m$ where both σ_u and m may be temperature dependent and must be evaluated at each location. The load history integrating stress variations but also temperature changes is represented by:

$$\tilde{\omega}(t) = \max_{t' \in [0,t]} \omega(t') \quad (13)$$

Finally the failure probability is given by

$$P_R(t) = 1 - \exp(-\Omega(t)) \quad \text{with} \quad \Omega(t) = \int_V \tilde{\omega}(t) \frac{dV}{V_0} \quad (14)$$

It is indeed no longer possible to define a Weibull stress and to use experimental results obtained at different temperatures to adjust the model parameters.

The value of σ_u was adjusted as a function of temperature in order to match dynamic experiments in the whole temperature range. It was then applied to predict quasi-static tests. The value of m was assumed to be

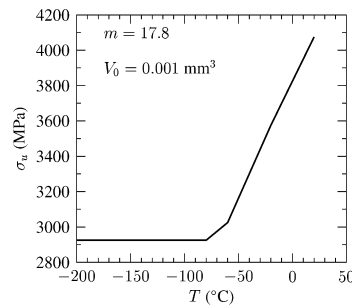


Fig. 13. σ_u as a function of temperature.

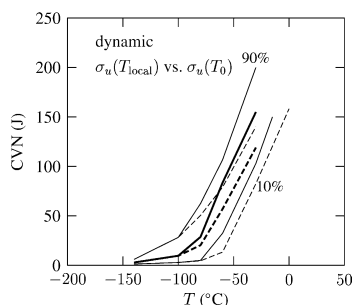


Fig. 14. Comparison of the Charpy transition curves predicted using the local value of the temperature to compute σ_u (solid lines) and using the initial uniform value of the temperature to compute σ_u (dashed lines).

constant and equal to 17.8. The adjusted function for the value of σ_u is shown in Fig. 13. The increase of σ_u with temperature implies that the cleavage initiation sites remain the same but are more difficult to trigger. Comparisons with experiments are shown in Fig. 12(b) for dynamic conditions and Fig. 12(d) for quasi-static conditions showing a good agreement for both loading conditions. Note that a less good agreement was obtained for dynamic tests when postprocessing the calculation with a uniform value for σ_u corresponding to the initial test temperature, i.e. not taking into account the local temperature increase (Fig. 14). As shown in Fig. 12 the values of TK_7 given in [1] (Table 3) are well reproduced using a temperature dependent value for σ_u . In particular, the model shows that the DBT temperature is slightly affected by the impact velocity; this results from a complex interaction, which can only be described by a detailed modeling, between stress increase due to viscosity, temperature increase and ductile crack propagation.

As previously noted, some scatter is also observed in the purely ductile failure region. This scatter is not accounted for in the present modeling as it would require numerous simulations integrating material heterogeneities [41,51]. In the transition region where some ductile crack extension occurs, some of the experimental dispersion is likely due to the ductile failure process and not only to the brittle fracture.

6. Discussion: simulating the Charpy test

As shown in this study, the Charpy test is a complex test which involves many effects. This complexity makes the Charpy test difficult to simulate and difficult to interpret as a fracture test as most of the effects are not related to damage processes leading to rupture. In the following, these effects are reviewed and discussed in order to determine if they can be neglected:

Inertial effects. Based on previous studies [6,36,37], inertial effects can be neglected as soon as large scale yielding is reached. This is always the case in the transition regime. Only simulations of the Charpy tests below -150 °C would require to account for inertia.

2D/3D calculations. Performing 2D plane strain (PE) simulations instead of 3D calculations represents a tremendous reduction of the computation time in particular in the case of implicit 3D codes. Unfortunately, the difference between both calculations is important as shown in Fig. 15. Compared to the 3D calculation, the PE simulations largely overestimate the load (computed assuming a beam thickness of 10 mm) and consequently the Charpy energy and overestimate crack advance. These results are in agreement with other studies [11,12,56] Accordingly, due to the higher stress level in the fracture process zone the brittle failure probability increases faster using PE calculations, compared to 3D simulations.

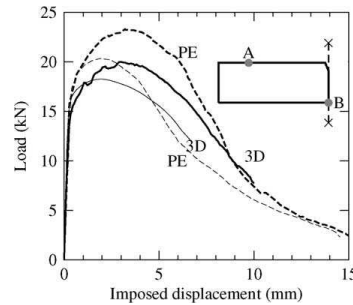


Fig. 15. Effect of loading conditions: comparison of calculations (load–displacement) carried out using plane strain (PE, dashed lines) or 3D elements (solid lines) with contact (thick lines) or without contact (thin lines) ($T = -60$ °C). The sketch illustrates how the boundary conditions are applied when contact is not accounted for.

Contact. Neglecting contact can be done by imposing a fixed displacement on the opposite side of the notch and a zero displacement on the initial contact line between the anvil and the specimen. This technique has been used in [6,57]. Comparison of PE and 3D calculations with or without contact are shown in Fig. 15. Calculations were performed using the same mesh for the Charpy specimen. In the case where displacements are imposed, the boundary conditions are as follows (see Fig. 15): $u_y = 0$ at point A and $u_y = v_i t$ at point B where v_i is the impact velocity and t the time. In case of 3D meshes points A and B represent a row of nodes. These boundary conditions slightly differ from those used in [6,57] where the displacements $v_i t$ is prescribed over a surface and not a line.

A significant difference is observed for both plane strain and 3D calculations. Calculations without contact develop higher stresses (and higher stress triaxiality) in the notch plane causing earlier ductile crack initiation and earlier brittle failure. In the case of large striker displacements, the location of the contact zone between the striker and the specimen changes from the center to the side of the striker (Fig. 10). This shows that accounting for contact is necessary in particular when a comparison with actual experimental data is needed. Neglecting contact can be used when investigating trends as done in many papers (see e.g. [6,7,9]).

Adiabatic heating and heat diffusion. As shown in Fig. 8, the difference between computed loads using isothermal or adiabatic conditions is large as soon as crack growth begins. The difference regarding crack extension and Weibull stress is also important. Consequently, the production of heat by plastic deformation cannot be neglected. Another problem arises in the transition region as the duration t_r of the test (about 2 ms) could be large enough so that significant heat diffusion could take place. Typical values for the heat diffusivity D of ferritic steels are equal to $2 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ [27]. The corresponding diffusion length is equal to $x_D = \sqrt{D t_r} = 0.2 \text{ mm}$ which is about the mesh size used in this study. This indicates that neglecting heat diffusion is still possible but that accounting for this phenomenon would slightly improve the accuracy of the simulation but would largely increase the difficulties in the numerical calculations.

Viscoplasticity. Accounting for viscoplasticity is important as the difference between quasi-static and dynamic tests is large. At high impact velocities, stresses are increased, which causes earlier brittle failure (Fig. 12) but also increases the ductile upper shelf energy (about 40 J). Both effects are correctly represented by the model developed in this work. As shown in [22], the original Rousselier model cannot be used to model damage growth in the case of a rate dependent material. The present study uses a modified version of the model [22]. Another solution was proposed by Sainte-Catherine et al. [58].

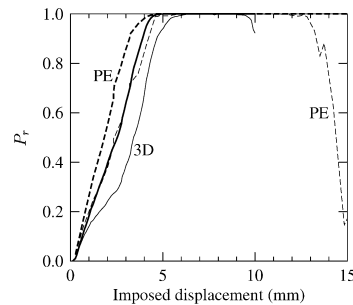


Fig. 16. Effect of the failure probability computation mode: Comparison of calculations of the rupture probability using plane strain (PE, dashed lines) or 3D elements (solid lines) with $\bar{\sigma}_{1p}$ (thick lines) or σ_{1p} (thin lines) ($T = -60$ °C).

Stress history. In the literature, the calculation of the failure probability after ductile tearing is performed either using the current stress σ_{1p} (e.g. [59,60]) or the maximum stress over the load history $\bar{\sigma}_{1p}$ (e.g. [29,30,37,43,61,62]). Computed fracture probability using σ_{1p} or $\bar{\sigma}_{1p}$ are compared in Fig. 16. Using $\bar{\sigma}_{1p}$ leads to significantly higher failure probability for a given displacement. In addition for very large crack advance, the probability computed using σ_{1p} may decrease illustrating the large stress drop that occurs when the crack reaches the free surface. This also clearly shows that this way of computing the failure probability is not suitable. Note that in the case of small scale yielding plasticity, the difference between both methods can remain very small as shown in [63].

Shear lips. In actual tests, shear lips are created on both free sides of the notch (Fig. 10). It remains, however, difficult to model this phenomenon and a very large number of elements would be required [23]. The question of the importance of the shear lip formation on the rupture energy still remains an open question.

7. Conclusions

A model of the behavior of ferritic steels including a description of viscoplasticity, ductile damage and brittle failure has been used to simulate the Charpy transition curve for a pressure vessel steel. An accurate simulation of the load–displacement curve and a good representation of ductile crack growth under both dynamic and quasi-static conditions is obtained using ductile damage parameters identified at 20 °C and a temperature dependent viscoplastic law. Using brittle failure model parameters identified in the fully brittle domain ($T < -150$ °C) allows the simulation of the lower part of the transition curve up to -80 °C. Above this temperature, the original model gives a pessimistic prediction of fracture energies. It then becomes necessary to use a temperature dependent σ_u parameter in the Beremin model to represent the end of the transition curve. A consistent extension of the Beremin model is proposed for this case. Using this modification it becomes possible to represent experimental results under both dynamic and quasi-static conditions which gives some confidence in the applicability of the modified model.

Some minor refinements (e.g., heat diffusion, inertia effects) could still improve the simulation. However the main difficulty encountered in interpreting the Charpy test is that a temperature dependent σ_u parameter must be used to correctly predict the sharp increase of CVN in the transition regime. Similar solutions have been adopted by other authors (see e.g. [53,64,65]) to model both CVN and toughness. The micromechanical causes of the need for an increasing σ_u parameter remain however unclear. The

explanation based on the elimination of cleavage nucleation sites at carbides caused by ductile void nucleation proposed by Bernauer et al. [43] cannot be invoked for this material as strain levels at the onset of nucleation are too high. A change in cleavage controlling mechanisms (see e.g. [65]) or in default population are more likely to be responsible for the observed phenomenon but further detailed investigations are needed.

Acknowledgements

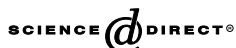
Financial support from Direction de la Sureté des Installations nucléaires (DSIN) and Electricité de France (EdF) is acknowledged. Technical support from B. Marini (CEA—Saclay) and Y. Grandjean (EdF—Chinon) is also acknowledged. Special thanks to Dr. L. Laiarinandrasana for fruitful discussion about numerical simulation.

References

- [1] Tanguy B, Besson J, Piques R, Pineau A. Ductile–brittle transition of a A508 steel characterized by the Charpy impact test. Part— I: experimental results. *Engng Fract Mech* 2004, in press.
- [2] Russell S. Experiments with a new machine for testing materials by impact. *Trans Am Soc Civil Engrs* 1898;39(826):237–50.
- [3] Charpy G. Note sur l'essai des métaux à la flexion par choc de barreaux entaillés. *Mém Comp Rend Soc Ingnr Civil France* 1901:848–77.
- [4] Norris D. Computer simulation of the Charpy V-notch toughness test. *Engng Fract Mech* 1979;11:261–74.
- [5] Tvergaard V, Needleman A. Effect of material rate sensitivity on failure modes in the Charpy V-notch test. *J Mech Phys Solids* 1986;34(3):213–41.
- [6] Tvergaard V, Needleman A. An analysis of the temperature and rate dependence of Charpy V-Notch energies for a high nitrogen steel. *Int J Fract* 1988;37:197–215.
- [7] Mathur K, Needleman A, Tvergaard V. Dynamic 3D analysis of the Charpy V-notch test. *Modelling Simul Mater Sci Engng* 1993;1:467–84.
- [8] Mathur K, Needleman A, Tvergaard V. 3D analysis of failure modes in the Charpy impact test. *Model Simul Mater Sci Engng* 1994;2:617–35.
- [9] Benzerga A, Tvergaard V, Needleman A. Size effects in the Charpy V-notch test. *Int J Fract* 2002;116:275–96.
- [10] Böhme W, Sun D, Schmitt W, Höning A. Application of micromechanical material models to the evaluation of Charpy tests. In: Giovanola J, editor. *Advances in fracture/damage models for the analysis of engineering problems*. New York: ASME; 1992. p. 203–16.
- [11] Schmitt W, Sun D, Blauel J. Recent advances in the application of the Gurson model to the evaluation of ductile fracture toughness. In: *Recent advances in fracture, TMS*; 1997. p. 77–87.
- [12] Rossoll A, Berdin C, Prioul C. Determination of the fracture toughness of a low alloy steel by the instrumented Charpy impact test. *Int J Fract* 2002;115:205–26.
- [13] Folch L, Burdekin F. Application of coupled brittle ductile model to study correlation between Charpy energy and fracture toughness values. *Engng Fract Mech* 1999;63:57–80.
- [14] Sainte-Catherine C, Hourdequin N, Galon P, Forget P. Finite element simulations of Charpy-V and sub-size tests for a low alloy RPV ferritic steel. In: *ECF 13, Fracture Mechanics: Applications and Challenges*. Amsterdam: Elsevier Science; 2000.
- [15] Franklin AG. Comparison between a quantitative microscope and chemical methods for assessment of non-metallic inclusions. *J Iron Steel Inst* 1969:181–6.
- [16] Tanguy B, Piques R, Laiarinandrasana L, Pineau A. Mechanical behaviour of A508 steel based on double nonlinear viscoplastic constitutive equation. In: Miannay D, Costa P, François D, Pineau A, editors. *EUROMAT 2000, Advances in Mechanical Behaviour Plasticity and Damage*, Tours, France. Amsterdam: Elsevier; 2000. p. 499–504.
- [17] Campbell J, Ferguson W. The temperature and strain-rate dependence of the shear strength of mild steel. *Philos Mag* 1970;21:63–82.
- [18] Tvergaard V. Material failure by void growth to coalescence. *Adv Appl Mech* 1989;27:83–151.
- [19] Rousselier G. Ductile fracture models and their potential in local approach of fracture. *Nucl Engng Design* 1987;105:97–111.
- [20] Lemaitre J. *A course on damage mechanics*. Springer Verlag; 1996.
- [21] Lemaitre J. A continuous damage mechanics model for ductile fracture. *J Engng Mater Technology* 1985;107:83–9.

- [22] Tanguy B, Besson J. An extension of the Rousselier model to viscoplastic temperature dependent materials. *Int J Fract* 2002;116(1):81–101.
- [23] Besson J, Steglich D, Brocks W. Modeling of crack growth in round bars and plane strain specimens. *Int J Solids Struct* 2001;38(46–47):8259–84.
- [24] Shima S, Oyane M. Plasticity theory for porous metals. *Int J Mech Sci* 1976;18:285–91.
- [25] Chu C, Needleman A. Void nucleation effects in biaxially stretched sheets. *J Engng Mater Technol* 1980;102:249–56.
- [26] Zhang Z, Thaulow C, Ødegård J. A complete Gurson model approach for ductile fracture. *Engng Fract Mech* 2000;67(2):155–68.
- [27] Tigges D. Nocivité des défauts sous revêtement des cuves de réacteurs à eau sous pression. PhD thesis, Ecole des Mines de Paris; 1995.
- [28] Beremin FM. A local criterion for cleavage fracture of a nuclear pressure vessel steel. *Met Trans* 1983;14A:2277–87.
- [29] Tanguy B, Besson J, Piques R, Pineau A. Numerical modelling of Charpy V-notch tests. In: François D, Pineau A, editors. *From Charpy to present impact testing*. ESIS Publ 2002;30:461–468.
- [30] Lefevre W, Barbier G, Masson R, Rousselier G. A modified Beremin model to simulate the warm pre-stress effect. *Nucl Engng Design* 2002;216:27–42.
- [31] Besson J, Foerch R. Large scale object-oriented finite element code design. *Comp Meth Appl Mech Engng* 1997;142:165–87.
- [32] Simo J, Taylor R. Consistent tangent operators for rate-independent elastoplasticity. *Comp Meth Appl Mech Engng* 1985;48:101–18.
- [33] Ladevèze P. Sur la théorie de la plasticité en grandes déformations. Technical report, Rapport interne No. 9, LMT, ENS Cachan; 1980.
- [34] Besson J, Cailletaud G, Chaboche J-L, Forest S. *Mécanique non-linéaire des matériaux*. Hermes; 2001.
- [35] AFNOR. Essai de flexion par choc sur éprouvette Charpy. Partie 1: méthode d'essai, Association française de normalisation, La Défense, France; 1990.
- [36] Tahar M. Applications de l'approche locale de la rupture fragile à l'acier 16MND5: Corrélation résilience-ténacité, Probabilité de rupture bimodale (clivage et intergranulaire). PhD thesis, Ecole des Mines de Paris; 1998.
- [37] Rossoll A, Berdin C, Forget P, Prioul C, Marini B. Mechanical aspects of the Charpy impact test. *Nucl Engng Design* 1999;188(2):217–29.
- [38] Schwalbe K-H. ESIS P6 98: Procedure to measure and calculate material parameters for the local approach to fracture using notched tensile specimens. Technical report, GKSS Research Centre; 1998.
- [39] Mackenzie A, Hancock J, Brown D. On the influence of state of stress on ductile failure initiation in high strength steels. *Engng Fract Mech* 1977;9:167–88.
- [40] Besson J. *Mécanique et Ingénierie des Matériaux—Essais mécaniques—Éprouvettes axisymétriques entaillées*. Hermes; 2001. p. 319–51.
- [41] Besson J, Devillers-Guerville L, Pineau A. Modeling of scatter and size effect in ductile fracture: Application to thermal embrittlement of duplex stainless steels. *Engng Fract Mech* 2000;67(2):169–90.
- [42] Grange M, Besson J, Andrieu E. An anisotropic Gurson model to represent the ductile rupture of hydrided Zircaloy-4 sheets. *Int J Fract* 2000;105(3):273–93.
- [43] Bernauer G, Brocks W, Schmitt W. Modifications of the Beremin model for cleavage fracture in the transition region of a ferritic steel. *Engng Fract Mech* 1999;64:305–25.
- [44] Tanguy B, Besson J, Pineau A. Comment on the effect of carbide distribution on the fracture toughness in the transition temperature region of an SA 508 steel. *Scrip Met* 2003;49:191–7.
- [45] Tvergaard V, Needleman A. Analysis of the cup-cone fracture in a round tensile bar. *Acta Met* 1984;32:157–69.
- [46] Xia L, Shih C, Hutchinson J. A computational approach to ductile crack growth under large scale yielding conditions. *J Mech Phys Solids* 1995;43(3):389–413.
- [47] Liu Y, Murakami S, Kanagawa Y. Mesh-dependence and stress singularity in finite element analysis of creep crack growth by continuum damage mechanics approach. *Eur J Mech* 1994;13A(3):395–417.
- [48] Gullerud A, Gao X, Dodds Jr R, Haj-Ali R. Simulation of ductile crack growth using computational cells: numerical aspects. *Engng Fract Mech* 2000;66:65–92.
- [49] Steglich D, Brocks W. Micromechanical modelling of damage and fracture of ductile materials. *Fatig Fract Engng Mater Struct* 1998;21:1175–88.
- [50] Rivalin F, Besson J, Di Fant M, Pineau A. Ductile tearing of pipeline-steel wide plates—II: modeling of in-plane crack propagation. *Engng Fract Mech* 2000;68(3):347–64.
- [51] Decamp K, Bauvineau L, Besson J, Pineau A. Size and geometry effects on ductile rupture of notched bars in a C–Mn steel: Experiments and modelling. *Int J Fract* 1997;88(1):1–18.
- [52] Tanguy B. Modélisation de l'essai Charpy par l'approche locale de la rupture. Application au cas de l'acier 16MND5 dans le domaine de la transition. PhD thesis, Ecole des Mines de Paris; 2001.
- [53] Margolin B, Kostylev V. Modeling for ductile-to-brittle transition under ductile crack growth for reactor pressure vessel steels. *Int J Pressure Vessels Piping* 1999;76:309–17.

- [54] Carassou S, Renevey S, Marini B, Pineau A. Modelling of the ductile to brittle transition of a low alloy steel. In: ECF 12, Fracture from defect, vol. II. 1998, p. 691–6.
- [55] Rossoll A, Berdin C, Prioul C. Charpy impact test modelling and local approach to fracture. In: François D, Pineau A, editors. From Charpy to present impact testing. ESIS Pub 2002;30:445–52.
- [56] Eberle A, Klingbeil D, Baer W, Wossidlo P, Häcker R. The calculation of dynamic J_R -curves from 2D and 3D finite element analyses of a Charpy test using a rate-dependent damage model. In: François D, Pineau A, editors. From Charpy to present impact testing. ESIS Pub 2002;30:403–10.
- [57] Benzerga A, Besson J, Batisse R, Pineau A. Synergistic effects of plastic anisotropy and void coalescence on fracture mode in plane strain. *Model Simulat Mater Sci Engng* 2002;10:73–102.
- [58] Sainte Catherine C, Poussard C, Vodinh J, Schill R, Hourdequin N, Galon P, Forget P. Finite element simulations and empirical correlation for Charpy-V and sub-size Charpy tests on an unirradiated low alloy RPV ferritic steel. In: Fourth symposium on small specimen test techniques. Reno, NV, ASTM STP 1418; 2002.
- [59] Moran P, Shih C. Crack growth and cleavage in mismatched welds: a micromechanics study using a cell model. *Int J Fract* 1998;92:153–74.
- [60] O'Dowd N, Lei Y, Busso E. Prediction of cleavage failure probabilities using the Weibull stress. *Engng Fract Mech* 2000;67:87–100.
- [61] Bakker A, Koers R. Prediction of cleavage fracture events in the brittle–ductile transition region of a ferritic steel. In: Defect assessment in components—fundamentals and applications. London: Mechanical Engineering Publications; 1991. p. 613–32.
- [62] Gao X, Faleskog J, Shih C. Analysis of ductile to cleavage transition in part through cracks using a cell model incorporating statistic. *Fatig Fract Engng Mater Struct* 1999;22:239–50.
- [63] Ruggieri C, Dodds Jr R. A transferability model for brittle fracture including constraint and ductile tearing effects: a probabilistic approach. *Int J Fract* 1996;79:309–40.
- [64] Wallin K, Saario T, Törrönen K. Statistical model for carbide induced brittle fracture in steel. *Metal Sci* 1984;18:13–6.
- [65] Martin-Meizoso A, Ocaña Arizcorreta I, Gil-Sevillano J, Fuentez-Pérez M. Modelling cleavage fracture of bainitic steels. *Acta Metal Mater* 1994;42(6):2057–68.

Available online at www.sciencedirect.com

Engineering Fracture Mechanics 73 (2006) 191–206

**Engineering
Fracture
Mechanics**

www.elsevier.com/locate/engfracmech

Local approach to fracture based prediction of the ΔT_{56J} and $\Delta T_{K_{Ic,100}}$ shifts due to irradiation for an A508 pressure vessel steel

B. Tanguy ^{a,*}, C. Bouchet ^a, S. Bugat ^b, J. Besson ^a^a Ecole des Mines de Paris, Centre des Matériaux, UMR CNRS 7633 BP 87, 91003 Evry Cedex, France^b EDF les Renardières, Route de Sens—Ecuelles, Moret-sur-Loing 77250, France

Received 7 December 2004; received in revised form 25 May 2005; accepted 26 May 2005

Available online 19 September 2005

Abstract

Nuclear pressure vessel steels are subjected to irradiation embrittlement which is monitored using Charpy tests. Reference index temperatures, such as the temperature for which the mean Charpy rupture energy is equal to 56 J (T_{56J}), are used as embrittlement indicators. The safety integrity evaluation is performed assuming that the shift of the nil-ductility reference temperature RT_{NDT} due to irradiation is equal to the shift of T_{56J} . A material model integrating a description of viscoplasticity, ductile damage and cleavage brittle fracture is used to simulate both the Charpy test and the fracture toughness test (CT geometry). The model is calibrated on the Charpy data obtained on an unirradiated A508 Cl.3 steel. It is then applied to irradiated materials assuming that irradiation affects solely hardening. Comparison with Charpy energy data for different amounts of irradiation shows that irradiation possibly also affects brittle fracture. The model is then applied to predict the fracture toughness shifts ($\Delta T_{K_{Ic,100}}$) for different levels of irradiation. © 2005 Elsevier Ltd. All rights reserved.

Keywords: Irradiation embrittlement; Ductile to brittle transition; Charpy test; Fracture toughness

1. Introduction

Reactor pressure vessels (RPV) of commercial nuclear power plants are subjected to embrittlement due to the exposure to high energy neutrons from the core. The current way to determine the effects of the degradation by radiation on the mechanical behavior of the RPV steels is the use of tensile and impact Charpy

* Corresponding author. Tel.: +(33) 1 60 76 30 61; fax: +(33) 1 60 76 31 50.
E-mail address: benoit.tanguy@ensmp.fr (B. Tanguy).

tests, from which reference index temperatures, such as the ductile to brittle transition (DBT) temperature, can be calculated. More conventionally in the French nuclear surveillance program, T_{56J} , the temperature for which the mean Charpy energy is equal to 56 J and its increase due to neutron irradiation are determined. The safety integrity evaluation based on a fracture toughness lower bound curve $K_{Ic}(T - RT_{NDT})$ [1] is then performed assuming that the shift of the nil-ductility reference temperature, RT_{NDT} , is equal to the shift of the embrittlement indicators, e.g. $\Delta RT_{NDT} = \Delta T_{56J}$ for a given fluence. This equivalence is of fundamental importance to structural integrity assessments of RPVs since such assessments are based on fracture toughness properties which are not generally measured directly. However some studies have shown large scatter in the relation between $\Delta T_{K_{Ic}}$ and Charpy index temperature shifts [2,3]. As the correlation between ΔT_{56J} and $\Delta T_{K_{Ic}}$ is purely empirical, a better understanding is needed. As the same physical mechanisms control the fracture in both impact V-notch and quasi-static precracked fracture toughness tests, the investigation of this relation using micro-mechanical models of fracture appears to be a very promising way.

The prediction of the Charpy V-notch energies, CVN, and K_{Ic} values vs temperature curves by means of the *Local Approach to Fracture* has led to several studies during the last decade devoted mainly to non-irradiated materials (see among others [4–9]). Within this framework, a micro-mechanical analysis of the Charpy test in order to model the DBT curve was proposed, among others [10], by some of the authors [11,12].

Assuming that the combined effects of large plastic strain and temperature on the cleavage mechanism lead to a temperature dependence of the average cleavage stress, it is then possible to predict accurately the whole Charpy energy transition curves [12], including the large scatter observed in the DBT range. This strategy allows to transfer the results of the Charpy tests to larger structures and further to study the effect of different damage mechanisms as irradiation or ageing on the DBT temperature. For example in the case of unirradiated materials, the evolution of the elastoplastic fracture toughness can be predicted based on Charpy impact data [9,13]. The aim of this study is to predict and to compare the irradiation induced shifts of index temperatures obtained from Charpy and fracture toughness tests using a micro-mechanical description of the involved damage processes. The effect of neutron irradiation on hardening properties and embrittlement of reactor pressure vessel steels is analyzed in Section 2. The modeling of the ductile to brittle transition is then detailed in Section 3 and the hypotheses considered to model the DBT temperature for irradiated materials are presented in Section 4. This strategy is then applied to simulate the irradiation-induced shifts of the Charpy DBT curve (Section 5) which are then compared to those of the quasi-static fracture toughness (Section 6).

2. Effect of neutron irradiation on the Charpy transition curves and hardening properties

For a given fluence (Φ (n/cm²)) of neutrons ($E > 1$ MeV) and irradiation temperature, irradiation induced embrittlement is strongly dependent of the material chemical composition, and specially on Cu, Ni, P contents [14]. The volume fraction of copper is an important factor in the hardening-induced embrittlement due to the irradiation induced defects. This has led to consider these chemical elements in the empirical embrittlement correlation models for the prediction of the shift of the reference index temperatures [15,16]. On the physical point of view, irradiation produces fine scale microstructures [17]. Their effects on the macroscopic behavior can be separated into two groups [17,18]: (i) change of the plastic hardening and (ii) embrittlement, one of the most well-known and well-described being phosphorous segregation at grain boundaries [17]. Hardening mechanisms include matrix and age hardening. Matrix hardening is due to radiation-produced point defect clusters and dislocation loops, referred to as the matrix damage contribution [18]. Age hardening is an irradiation-enhanced formation of copper-rich precipitates. These two hardening mechanisms cause an increase of the yield strength whereas phosphorous segregation causes grain boundaries embrittlement without any increase of hardness and may be responsible for intergranular

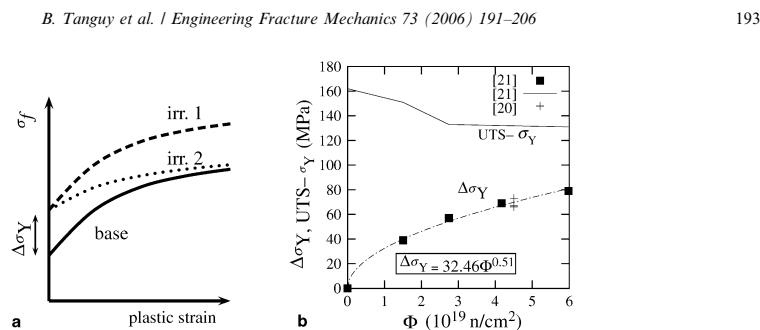


Fig. 1. (a) Two principal hypotheses concerning the evolution of the flow stress after neutron irradiation. (b) Evolution of $\Delta\sigma_Y$ and $UTS - \sigma_Y$ as a function of the irradiation flux for an A508 Cl.3 steel (base metal) ($T_{test} = 300$ °C) [21].

fracture [19]. It should be underlined that the micromechanical models developed in this study do not consider the embrittlement of the grain boundaries due to phosphorous segregation. Intragranular cleavage is assumed to be the prevailing mechanism controlling brittle fracture.

Two principal types of irradiation-induced hardening were found in the literature and are schematically represented on Fig. 1a. In the first case (dashed curve labeled irr. 1) the whole stress–strain curve of the unirradiated material is shifted to higher stress values by $\Delta\sigma_Y$, i.e. the strain hardening rate remains unchanged whereas the yield stress is increased [22,23]. This case was also experimentally observed on ferritic alloys irradiated at 288 °C by electron irradiation [24]. In the second case the yield stress is increased by $\Delta\sigma_Y$ whereas the ultimate tensile stress (UTS) remains almost unaffected by irradiation (dotted curve labeled irr. 2), i.e. that the hardening rate is substantially lower than in the unirradiated conditions. This case is reported for steels (ferritic, martensitic) subjected to neutron irradiation at low temperatures (≤ 200 °C) [25] and its importance increases with decreasing irradiation temperature [26]. At high irradiation doses, it is also suggested that neutron irradiation has a similar effect as a plastic prestrain on strain hardening [27].

The choice of the appropriate case is undoubtedly strongly dependent on the considered material: in pioneer studies on the interpretation of irradiation effects on low temperature fracture toughness, the second case was considered for an A533B steel [28] whereas it was the first case for an A508Cl.3 steel in [23]. The variation of the yield stress and the difference between the ultimate stress and the yield stress for an A508Cl.3 steel from the French surveillance program [20,21] with a chemical composition very close to the unirradiated A508 Cl.3 material considered in this study [29] and their evolutions with irradiation fluence are reported on Fig. 1b. The variation of the yield stress with fluence up to a maximum value of 6.0×10^{19} n/cm² is well represented by a power-law expression, $\Delta\sigma_Y = h\Phi^n$. A value of 0.51 is obtained for n which is representative of the low doses regime where the work hardening behavior is not altered by irradiation [25,30]. Data plotted in Fig. 1b shows that for fluence up to 6×10^{19} n/cm² (i.e. $\Delta\sigma_Y \sim 80$ MPa) the behavior of the investigated steel is closer to case irr. 1 which however slightly overestimates the actual UTS.¹ Therefore the hypothesis of unaltered work hardening behavior will be the only one considered in the present study. This will lead to higher computed stresses.

Considering both the impact and fracture toughness properties, it is well known that irradiation embrittlement induces an increase of the DBT temperature and therefore of the index T_{56J} [2,17,19,23,28,31]. As

¹ Rigorously, the variation of the ultimate stress is given by $\Delta UTS = 19.3\Phi^{0.51}$ showing that the hardening rate is slightly decreased with increasing level of irradiation.

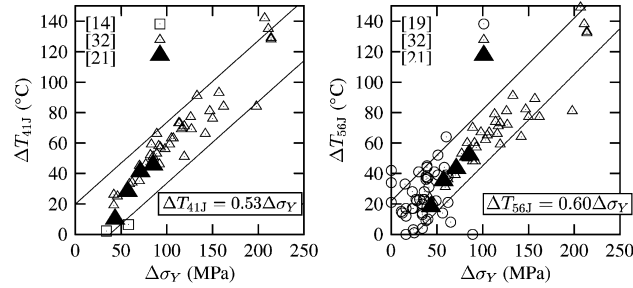


Fig. 2. Evolution of temperature indexes, ΔT_{41J} and ΔT_{56J} as a function of $\Delta\sigma_Y$ for various RPV base metals.

far as the upper shelf energy (USE) is concerned, most of the studies report a decrease with increasing irradiation level. This decrease being strongly dependent of the material considered for a given level of irradiation. Based on experimental evidences, linear correlations between the yield stress increase and the DBT temperature shift on the Charpy energy curves, $\Delta T_X = \alpha_X \Delta\sigma_Y$, have been proposed in the literature. In the French surveillance program, the shift of the index $T_{56J}(\Phi)$ is considered [19] whereas $T_{41J}(\Phi)$ is used in the American regulations. Based on the experimental values given in [14,19,21,32] where only A533 B and A508 Cl.3 structural steels are considered linear correlations between ΔT_{56J} , ΔT_{41J} and $\Delta\sigma_Y$ for various RPV base metals were established: $\Delta T_{56J} = 0.60\Delta\sigma_Y$ and $\Delta T_{41J} = 0.53\Delta\sigma_Y$ (see Fig. 2).

The established $\Delta T_{56J} = f(\Delta\sigma_Y(\Phi))$ correlation will be considered as the reference experimental database to which the predictions developed in this study for Charpy tests will be compared. For fracture toughness tests, the level of $100 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$, which is also considered in the Master curve approach [33,34] to define the reference temperature, T_0 , will be used. The finite element (FE) simulations of fracture toughness tests for different levels of irradiation will be then used to determine the shift of the index $\Delta T_{K_{Ic,100}}$. These predicted shifts will be then compared to the shift of impact toughness ΔT_{56J} .

3. Modeling of the ductile to brittle transition

The behavior of the reference unirradiated A508 Cl.3 steel of this study is presented in the following. More details can be found in [12,29,35]. The material model consists of three parts: (i) a temperature and strain rate dependent viscoplastic model describing the behavior of the undamaged material, (ii) a model for ductile tearing and (iii) a model for transgranular cleavage fracture.

3.1. Viscoplastic behavior and ductile failure

A modified Rousselier model [36] which is able to handle strain rate and temperature dependence of the material behavior is used to represent ductile failure. In this model, as in the well-known GTN model [37], a single damage parameter which represents the void volume fraction, f , is used to model ductile fracture.

The model is based on the implicit definition of an effective stress (σ_\star) which is a function of both the macroscopic Cauchy stress (σ) and of the porosity:

$$\frac{\sigma_{\text{eq}}}{(1-f)\sigma_\star} + \frac{2}{3}fD_R \exp\left(\frac{q_R}{2} \frac{\sigma_{kk}}{(1-f)\sigma_\star}\right) - 1 \stackrel{\text{def.}\sigma_\star}{=} 0, \quad (1)$$

where σ_{eq} is the von Mises equivalent stress and σ_{kk} the trace of the stress tensor, while q_{R} and D_{R} are material parameters which need to be adjusted.

The viscoplastic yield function is written as:

$$\phi = \sigma_{\star} - R(p), \quad (2)$$

where the flow stress R as a function of the effective plastic strain, p is given by:

$$R(p, T) = \sigma_{\text{Y}}(T) + Q_1(T)(1 - \exp(-b_1(T) \times p)) + Q_2(1 - \exp(-b_2 \times p)), \quad (3)$$

where the yield stress $\sigma_{\text{Y}}(T)$, $Q_1(T)$ and $b_1(T)$ are temperature dependent. The values of the parameters of Eq. (3) can be found in [12]. Viscoplastic flow occurs when $\phi \geq 0$. The equivalent plastic strain rate \dot{p} is given by the viscoplastic flow function $\dot{p} = \mathbf{F}(\sigma_{\star} - R)$ which is expressed as:

$$\frac{1}{\dot{p}} = \frac{1}{\mathbf{F}} = \frac{1}{\dot{\epsilon}_1} + \frac{1}{\dot{\epsilon}_2} \quad \text{with} \quad \dot{\epsilon}_i = \left\langle \frac{\sigma_{\star} - R}{K_i} \right\rangle^{n_i}, \quad i = 1, 2. \quad (4)$$

The strain rates $\dot{\epsilon}_1$ and $\dot{\epsilon}_2$ are each representative of a deformation mechanism: (1) Peierls friction, (2) phonon drag. Deformation is controlled by the slowest mechanism. Here it is important to underline that the viscoplastic model is identified in the whole range of strain rates (10^{-4} up to 4000 s^{-1}), temperatures (-196 up to $300 \text{ }^{\circ}\text{C}$) and plastic strains (up to 1.0 using the Bridgman analysis) encountered during the Charpy test and the quasi-static fracture toughness test in the whole DBT range including fully ductile behavior.

The plastic strain rate tensor is given by the normality rule as:

$$\dot{\epsilon}_{\text{p}} = (1 - f)\dot{p} \frac{\partial \phi}{\partial \underline{\sigma}} = (1 - f)\dot{p} \frac{\partial \sigma_{\star}}{\partial \underline{\sigma}}. \quad (5)$$

The evolution of the damage variable is governed by mass conservation modified to account for nucleation of new voids [37,38]:

$$\dot{f} = (1 - f)\text{trace}(\dot{\epsilon}_{\text{p}}) + A_{\text{n}}\dot{p}. \quad (6)$$

In this expression, the first right handside term corresponds to void growth and the second one to strain controlled nucleation. A_{n} is a material parameter representing the nucleation rate [39]. All model parameters directly related to ductile fracture (i.e. q_{R} , D_{R} and A_{n}) are assumed to be temperature independent.

Under quasi-static loading, isothermal conditions are assumed. Under rapid loading corresponding to adiabatic conditions, the temperature T increases due to plastic deformation. In the following, the temperature evolution is written as:

$$C_{\text{p}}\dot{T} = \beta \dot{\epsilon}_{\text{p}} : \underline{\sigma} = (1 - f)\beta \dot{p} \sigma_{\star}, \quad (7)$$

where C_{p} is the volume heat capacity and β a constant factor. Note that C_{p} equals $(1 - f)C_{\text{p}}^0$ where C_{p}^0 is the heat capacity of the undamaged material so that $C_{\text{p}}^0\dot{T} = \beta \dot{p} \sigma_{\star}$.

The constitutive equations lead to softening up to crack initiation and propagation so that a material scale length is required. In the following, this length, l , is identified to the mesh size which must be adjusted. As the model parameters are numerous, some of them were directly obtained from the metallurgical analysis of the material. In the present case, the initial porosity is set equal to the manganese sulfide (MnS) inclusions volume fraction (i.e. $f_0 = 1.75 \times 10^{-4}$). Cross section examinations of notched bars and Charpy specimen, show that secondary voids are nucleated on cementite particles (Fe_3C) at high levels of plastic strain. Nucleation starts for $p \approx 0.5$ [29]. The carbide volume fraction is obtained from the chemical composition of the material: 2.3%. This sets the maximum value of the nucleated porosity. Nucleation is assumed to end for $p \approx 1.1$ which is the level of plastic deformation in a tensile bar close to the rupture

surface. Consequently the nucleation rate parameter A_n (Eq. (6)) is set to 0.038 for $0.5 \leq p \leq 1.1$ and to 0.0 otherwise. The other parameters were obtained fitting the model on experimental results from notch tensile bars (NT) with different notch radii at room temperature [12]. The following model parameters were used: $q_R = 0.89$, $D_R = 2.2$ and $l = 100 \mu\text{m}$.

3.2. Brittle failure

The description of brittle failure is derived from the Beremin model [40] which assumes the well-accepted assumption that cleavage is controlled by the propagation of the weakest link among a pre-existing population of statistically size-distributed microcracks. The model uses the following definition of a local effective stress for brittle failure σ_{Ip} :

$$\sigma_{Ip} = \begin{cases} \sigma_I \exp(-p/k) & \text{if } \dot{p} > 0, p > p_c, \\ 0 & \text{otherwise,} \end{cases} \quad (8)$$

where σ_I is the maximum principal stress of $\underline{\sigma}$. The condition $\dot{p} > 0$ expresses the fact than failure can only occur when plastic deformation occurs. The $\exp(-p/k)$ term has been proposed in [40] to phenomenologically account for grain shape changes or crack blunting induced by plastic deformation. p_c is the critical strain over which cleavage can occur. This brittle failure model can be applied as a post-processor of calculations including ductile tearing. In this case, care must be taken while computing the failure probability as ductile crack advance leads to unloading of the material left behind the crack front. Considering that each material point is subjected to a load history, $\underline{\sigma}(t)$, $p(t)$ ($t = \text{time}$) the probability of survival of each point at time t is determined by the maximum load level in the time interval $[0, t]$. An effective failure stress $\tilde{\sigma}_{Ip}$ is then defined as,

$$\tilde{\sigma}_{Ip}(t) = \max_{t' \in [0, t]} \sigma_{Ip}(t'). \quad (9)$$

The failure probability, P_R , is obtained by computing the Weibull stress, σ_w :

$$\sigma_w = \left[\int_V \tilde{\sigma}_{Ip}^m \frac{dV}{V_0} \right]^{1/m} \quad P_R = 1 - \exp \left[- \left(\frac{\sigma_w}{\sigma_u} \right)^m \right], \quad (10)$$

where the volume integral is taken over the whole volume of the specimen. V_0 is a reference volume which can be arbitrarily fixed. m is the Weibull modulus which describes the scatter of the distribution, σ_u is a scaling parameter which can be interpreted as a measure of the mean cleavage strength of a reference volume V_0 . Model parameters (σ_u , m , k , p_c) must be adjusted.

The original model is adapted to account for the temperature dependence of the model parameters [12]. The rupture probability of a volume element is then no longer represented by σ_{Ip} but by $\omega = (\sigma_{Ip}/\sigma_u)^m$ where both σ_u and m may be temperature dependent. The load history integrating stress variations but also temperature changes is represented by:

$$\tilde{\omega}(t) = \max_{t' \in [0, t]} \omega(t'). \quad (11)$$

Finally the failure probability is given by:

$$P_R(t) = 1 - \exp(-\Omega(t)) \quad \text{with} \quad \Omega(t) = \int_V \tilde{\omega}(t) \frac{dV}{V_0}. \quad (12)$$

The parameters of the model for brittle fracture have been identified using NT bars tested at low temperature ($T \leq -150 \text{ }^\circ\text{C}$): $m = 17.8$, $k = 4$, $p_c = 0$ and $\sigma_u = 2925 \text{ MPa}$ for $V_0 = 100 \mu\text{m}^3$.

3.3. Ductile to brittle transition

The ductile to brittle transition is modeled by simulating ductile tearing and by post-processing the results in order to obtain the brittle failure probability. There is therefore no specific model for the transition. This methodology has shown to be able to predict mean values as well as scatter of impact and quasi-static Charpy energies from low temperatures up to $-80\text{ }^{\circ}\text{C}$ (including the 56 J level of impact Charpy energy) using the cleavage model parameters identified at low temperatures ($T \leq -150\text{ }^{\circ}\text{C}$), i.e. with constant values for these parameters. However it is necessary to introduce a temperature dependent σ_u parameter above a threshold temperature ($\approx -80\text{ }^{\circ}\text{C}$) to model the sharp upturn of the Charpy transition curve and to describe the upper part of the curve [12] (Fig. 5).

This apparent effect of temperature on the cleavage mechanism which maybe combines the effects of large plastic strain, temperature-induced inhomogeneities of local stress-strain fields [41] and a possible change of the critical defects population is not within the scope of this paper and is under investigation.

4. Simulation of the ductile to brittle transition for irradiated materials

All the simulations presented here are conducted using the implicit finite element code ZeBuLon [42]. The FE meshes used to simulate the Charpy and the Compact tension specimens are shown on Fig. 3. Details can be found in [12]. For both specimens only $\frac{1}{2}$ is meshed due to symmetries. The Charpy specimen, striker and anvil sizes and geometries are those of the AFNOR standard [43]. For the CT specimens an initial crack ratio $a_0/W = 0.55$ has been considered. Full 3D computations have been carried out for both geometries.

Using the previously described models and the hypothesis that the effect of neutron irradiation on DBT temperature shifts can be quantitatively assessed in terms of the effects of irradiation on the flow properties of the material, it becomes possible to model the effect of irradiation on the ductile to brittle transition and to quantitatively forecast the Charpy energy or fracture toughness versus temperature curves. Obviously the increase of the flow stress has two consequences: (i) stresses in the material increase causing earlier brittle failure, (ii) the macroscopic load on the Charpy specimen increases causing an increase of the dissipated energy in the ductile regime so that the USE also increases. The USE is computed by propagating the ductile crack through the whole Charpy specimen. It is here assumed that the ductile and cleavage micromechanisms are not affected by irradiation. Based on literature results this assumption is discussed in the following sections.

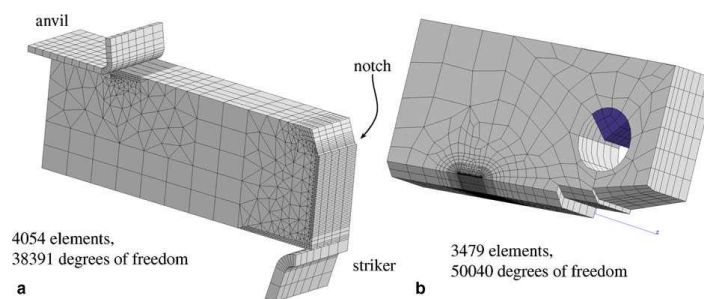


Fig. 3. Finite element meshes used for the analysis. (a) Charpy specimen and (b) CT specimen.

4.1. Effect of irradiation on ductile damage mechanisms

Studies of ductile damage mechanisms sensibility to irradiation are seldom in the published literature. The possible effect of irradiation on ductile damage has to be considered through the nucleation, growth and coalescence processes.

4.1.1. Nucleation

At a nano-scale level, numerous experiments on RPV steels, using techniques as small angle neutron scattering (SANS) [44] or atom probe analysis [45], have reported the creation of irradiation induced defects. Considering their mean size (few nm) it is unlikely they can act as potential nuclei for ductile damage. This assumption seems to be confirmed by the micrographs of fracture surfaces of irradiated Charpy specimen tested in the upper-shelf domain [46,47]. On these micrographs the mean size of the ductile voids appears to be of the order of few microns. Assuming that these voids have nucleated around nanosize precipitates would imply a void growth ratio of about 200 which is unrealistic. On the other hand the observed dimple size is characteristic of voids nucleated around carbides in such steels. Results concerning the irradiation effect on carbides are more ambiguous and seem to be strongly dependent on the chemical composition of the considered steel. In the case of French ferritic pressure vessel steels, it has been shown that no change in composition and size of M_2C or M_3C carbides can be attributed to the irradiation process [48]. The last population of particles to be considered is the MnS inclusions. Previous studies on A503 Cl.3 steels have shown that the void nucleation from such inclusions occurs for a very low deformation (<2%) [49] so that it can be considered as voids present in the virgin material. Therefore it is unlikely that irradiation will affect the void nucleation process of MnS. Based on these results, it is considered that the nature of defects involved in the nucleation process are unchanged by irradiation. Lacking of studies devoted to the correlation between the carbides void nucleation rate and irradiation has led to keep the void nucleation law established for the unirradiated material unchanged (Eq. (6)). However it should be kept in mind that an increase of the void nucleation rate may be due to irradiation as it was considered in [50] for vanadium alloyed RPV steels. In this study [50] it was considered that the segregation of phosphorous on carbide and non-metallic inclusion interfaces reduce the critical void nucleation strain. So that both the nucleation rate and total nucleated volume fraction are increased.

4.1.2. Growth

At a continuum scale changes of hardening properties may have an influence of the growth process of existing cavities issued from large inclusions. Cell computations [51] have shown that when the hardening rate remains unchanged, as it is almost the case for the steel considered in this study, there is little effect on void growth kinetic so that the model parameters are kept constant.

4.1.3. Coalescence

As the hardening rate of the studied material is not strongly affected by irradiation, at a first approximation it was considered that the localization kinetic which controls the coalescence process is not irradiation dependent. Nevertheless it is reminded that in case of high irradiation doses dislocation channel deformation develops and promotes strain localization. Moreover additional irradiation-induced precipitates between large voids issued from inclusions, as sulfides, are likely to change the coalescence process as described in [52].

4.2. Effect of irradiation on transgranular cleavage mechanisms

In the case of cleavage fracture, it has been often considered that at low temperatures the critical cleavage stress is not affected by irradiation [23,28] provided the fundamental mechanism remains identical, i.e.

stress propagation-controlled transgranular cleavage. It is often argued in the literature that for ferritic steels the local critical cleavage stress, σ_c , is controlled by the coarse-scale trigger particle microstructure and by the microarrest toughness, k_{ic} , of the ferrite matrix [53] and that fine scale irradiation induced features are not expected to have an influence on σ_c and k_{ic} . Therefore the mean cleavage fracture stress will be first considered as independent on irradiation. Considering the cleavage model presented in Section 3.2 it means that all the model parameters are unaffected by irradiation.

4.3. Effect of irradiation on the temperature dependence of the yield stress

In order to simulate the whole DBT curve, FE modeling of Charpy-V notch and CT specimens have been carried out in the temperature ranges $[-140\text{ }^\circ\text{C};+100\text{ }^\circ\text{C}]$ and $[-100\text{ }^\circ\text{C};+100\text{ }^\circ\text{C}]$, respectively. The increase of yield stress due to irradiation in the whole temperature range investigated is then needed. A first approach is to consider that the hardening observed at one temperature is the same in the whole temperature range [3,23]. This relies on the fact that the microstructures produced by both matrix- and age-hardening provide only long-range barriers to dislocation motion whereas the temperature dependence of the flow properties is controlled by the lattice spacing so that the thermal part of the yield stress should be weakly affected by irradiation. However experimental data published in the literature show a slight modification of the yield stress temperature dependence with irradiation especially at low temperatures [21,54,55]. Using these experimental data the yield stress can be expressed as a function of the temperature and of the fluence as

$$\sigma_Y(\Phi, T) = \sigma_Y(\Phi = 0, T) + \Delta\sigma_Y(\Phi, T = 300) \times g(T), \quad (13)$$

where $g(T)$ is given by

$$g(T) = 1 + 0.83 \exp\left(-\alpha_1 \frac{T}{T_0}\right) - 0.616 \exp\left(-\alpha_2 \frac{T}{T_0}\right) \quad (14)$$

with $\alpha_1 = 2.81$, $\alpha_2 = 3.0$ and $T_0 = 273.15\text{ }^\circ\text{C}$.

5. Simulation of the irradiation-induced shifts of the Charpy DBT curve

In a previous study [56], the Charpy transition curve was simulated for different values of $\Delta\sigma_Y$, i.e. for different levels of irradiation, equal to 45 (low irradiation level), 88 (mean irradiation level) and 150 MPa (high irradiation level). For irradiation levels higher than those reported on Fig. 1b and up to $\Delta\sigma_Y = 150\text{ MPa}$, it is assumed that the saturation in irradiation hardening is not reached and that the deformation mode remains unchanged [25,57] (i.e. no dislocation channel deformation). Results for the shifts obtained on the reference temperatures, ΔT_{56J} and ΔT_{41J} are reported on Fig. 4.

As the trends observed for both temperature indexes are similar, comments will focus on the ΔT_{56J} index (Fig. 4a). For the three values of $\Delta\sigma_Y$, it is shown that ΔT_{56J} is always underestimated assuming that the temperature dependent value of $\sigma_u(T)$ is unaffected by irradiation (dotted line in Fig. 4a). Assuming that σ_u is a constant equal to the low temperature value for the unirradiated material (2925 MPa) gives a conservative estimation of ΔT_{56J} (dashed line in Fig. 4a). Up to a value of about $\Delta\sigma_Y = 88\text{ MPa}$, the model gives an estimation which corresponds to the upper band of the experimental data. To obtain the mean temperature shift given in Fig. 2b, the parameter σ_u has to be assumed to be also affected by irradiation (full line in Fig. 4a). The parameter for the irradiated material is then expressed as: $\sigma_u^{\text{irr}} = \sigma_u(T + \Delta T_\phi)$.

The shift ΔT_ϕ depends on the level of irradiation, it is calculated in order to represent the experimental correlation between ΔT_{56J} and $\Delta\sigma_Y$ (Fig. 2b) and is given in Fig. 5 for the three values of $\Delta\sigma_Y$. It is shown in

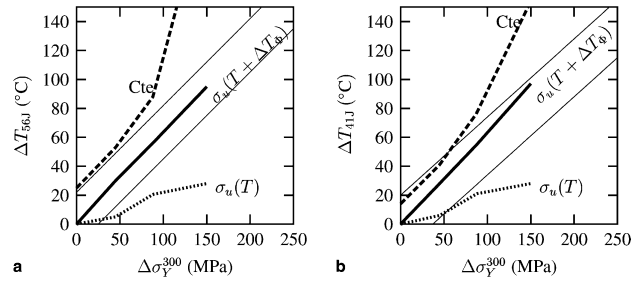


Fig. 4. Prediction of ΔT_{56J} and ΔT_{41J} . Three hypotheses are used for the parameter σ_u : (i) constant value (low temperature value for the unirradiated material), (ii) temperature dependent σ_u (unirradiated material), (iii) temperature and irradiation dependent σ_u (Fig. 5). Thin lines recall the experimental range.

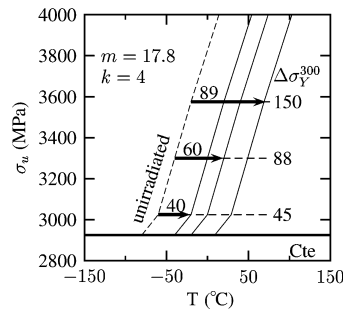


Fig. 5. Variation of σ_u as a function of temperature for the unirradiated material and for irradiation levels corresponding to an increase of the yield stress equal to 45, 88 and 150 MPa. Arrow indicates the temperature shift, ΔT_ϕ , caused by irradiation.

Fig. 4b, that the prediction for ΔT_{41J} is in reasonable agreement with experimental bounds up to the maximum $\Delta\sigma_Y$ considered in this study (150 MPa) using the same $\sigma_u(T + \Delta T_\phi)$ function.

Using the $\sigma_u(T + \Delta T_\phi)$ variation shown on Fig. 5, the predicted Charpy curves corresponding to a 50% cleavage failure probability for the considered $\Delta\sigma_Y$ values are reported on Fig. 6. On this figure the predicted Charpy energies corresponding to a ductile crack propagation of 0.2 and 0.5 mm are also drawn. The simulation results show that the energy level of 56 J (drawn with an arrow on each graph) corresponds to a ductile tearing between 0.2 and 0.5 mm. It is therefore necessary to take into account ductile damage to numerically estimate the shift of the index T_{56J} .

6. Simulation of the irradiation-induced shifts of the fracture toughness DBT curve

The same methodology has been applied to simulate the irradiation-induced shifts of the fracture toughness curve: the evolution of σ_u^{irr} determined to fit the $\Delta T_{56J} - \Delta\sigma_Y$ correlation was applied to predict the shift of $T_{K_{Ic,100}}$ as a function of $\Delta\sigma_Y$.

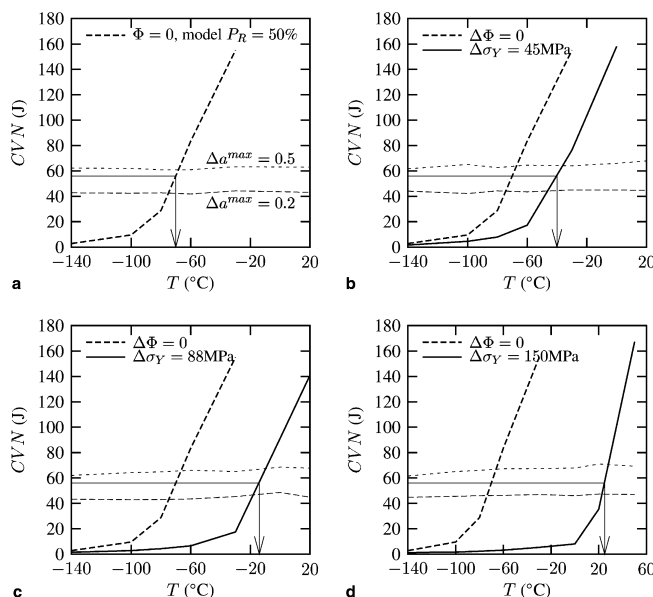


Fig. 6. Comparison of the unirradiated and irradiated predicted Charpy energy curves corresponding to a 50% cleavage failure probability as a function of temperature for different irradiation-induced increases of the yield stress, $\Delta\sigma_Y$. (a) Unirradiated material, (b) $\Delta\sigma_Y = 45$ MPa, (c) $\Delta\sigma_Y = 88$ MPa, (d) $\Delta\sigma_Y = 150$ MPa. The calculated temperature corresponding to a 56J level are indicated by an arrow on each graph. CVN energy levels corresponding to a ductile tearing of 0.2 and 0.5 mm are drawn with thin dashed lines on each graph.

The ability of the model to predict fracture toughness for the unirradiated material using the $\sigma_u(T)$ relation obtained from Charpy data was shown in a previous study [13] and is reported on Fig. 7a. As in this study no tests have been performed on irradiated A508 Cl.3 steel, data from literature on similar A508 Cl.3 steels [20,23] were used for comparison with the model predictions. The effect of irradiation on the shifts of the reference temperature, $T_{K_{Ic,100}}$ is reported on Fig. 7b, c and d.

For $\Delta\sigma_Y = 45$ and 88 MPa, a good agreement is obtained between the model predictions and available experimental data (see Fig. 7b and c). The fracture toughness levels corresponding to a ductile tearing of 0.2 and 0.5 mm are also shown on Fig. 7. It appears that for a level of $100 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ from which the shift of the toughness curve is obtained, ductile damage has not started to develop, the hypotheses concerning the irradiation effect on ductile damage do not have an influence on the predicted $\Delta T_{K_{Ic,100}}$.

The $\Delta T_{K_{Ic,100}}$ shift values obtained considering the 50% failure probability prediction are reported on each graph and a comparison with ΔT_{56J} is made in Table 1.

The predicted $\Delta T_{K_{Ic,100}}$ values are slightly higher than the shifts ΔT_{56J} , i.e. ΔRT_{NDT} . The difference decreases with increasing $\Delta\sigma_Y$.

Nevertheless as the predicted $\Delta T_{K_{Ic,100}}$ shifts are more important than the ΔT_{56J} shifts (ΔRT_{NDT}), the conservatism of the ASME K_{Ic} curve has to be checked for the irradiated material. The ASME K_{Ic} curve is plotted on each graph of Fig. 7 (thick line) using the ΔT_{56J} values given in Table 1 and the RT_{NDT} value

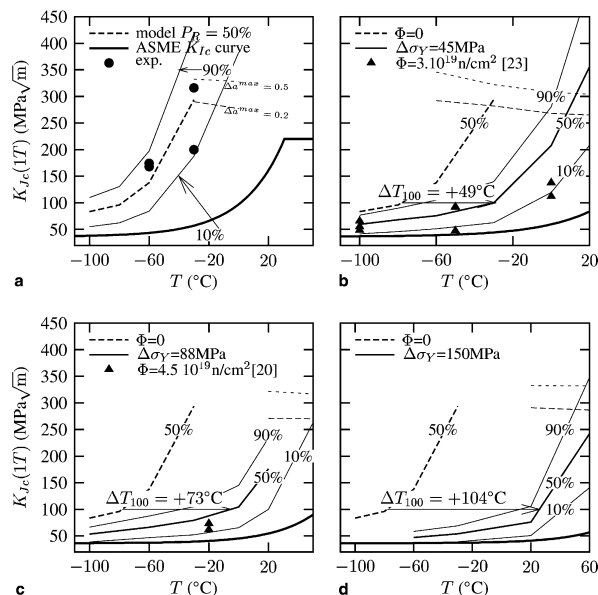


Fig. 7. Comparison of the unirradiated and irradiated predicted fracture toughness curve bounds ($P_p = 10\%$, 50% , 95%) of as a function of temperature for different irradiation-induced increases of the yield stress, $\Delta\sigma_y$. (a) Unirradiated material, (b) $\Delta\sigma_y = 45 \text{ MPa}$, (c) $\Delta\sigma_y = 88 \text{ MPa}$, (d) $\Delta\sigma_y = 150 \text{ MPa}$. The calculated temperature shifts at $100 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ referring to the unirradiated state are reported on each graph. The ASME K_{Ic} curves are represented with thick line ($RT_{NDT}^{\text{unirr}} = -27^\circ\text{C}$). Fracture toughness levels corresponding to a ductile tearing of 0.2 and 0.5 mm are drawn with thin dashed lines on each graph.

Table 1
Comparison between ΔT_{563} and predicted $\Delta T_{K_{Ic,100}}$ shifts

| $\Delta\sigma_y/\text{MPa}$ | $\Delta T_{563}/^\circ\text{C}$ | $\Delta T_{K_{Ic,100}}/^\circ\text{C}$ | $\Delta T_{K_{Ic,100}} - \Delta T_{563}/^\circ\text{C}$ |
|-----------------------------|---------------------------------|--|---|
| 45 | 30 | 49 | +19 |
| 88 | 56 | 73 | +17 |
| 150 | 95 | 104 | +9 |

of the unirradiated material ($RT_{NDT}^{\text{unirr}} = -27^\circ\text{C}$). It is shown that in the investigated range for $\Delta\sigma_y$, the model predictions are always less conservative than the ASME curve which remains a lower bound.

7. Discussion and conclusions

7.1. Simulation of the DBT curves for the unirradiated material

The ductile to brittle transition characterized by the Charpy impact test and quasi-static fracture toughness test has been modeled in the case of a RPV steel using constitutive equations for viscoplasticity, ductile

tearing and brittle failure. The whole Charpy and quasi-static fracture toughness transition curve of the base unirradiated material can be modeled provided the parameter σ_u of the Beremin model is considered to be an increasing function of temperature. This apparent effect of temperature on the cleavage mechanism is considered to be a combination of the effect of large plastic strain, temperature-induced inhomogeneity of local stress-strain fields and a possible change of the critical defects population. Moreover it should be reminded that the cleavage model considered in this study does not consider the microcracks nucleation step of the cleavage process (see e.g. [58]).

7.2. Simulation of the USE decrease due to irradiation

The irradiation-induced USE decrease reported in many experimental studies cannot be reproduced considering only the increase of the hardening properties. Following experimental results obtained on an A508 steel, the work hardening rate was considered to be unaffected by irradiation, at least in the fluence range considered here. Preliminary FE simulations of the Charpy test, not reported here, considering a decreasing hardening rate with irradiation (i.e. hypothesis irr. 2 on Fig. 1a), show that the enhanced localization induced by a lower hardening rate is not able to compensate for the increase of the maximum load level induced by the increase of the yield strength. As the Charpy energy is given by the area under the load-deflection curve, the deflection being the same when the behavior is fully ductile, the amount of energy is more important. This results in a higher upper shelf level. It should be also noted that fully ductile failure is obtained on irradiated materials at higher testing temperatures. This will induce a decrease of the USE if irradiation hardening is not considered. However for high levels of irradiation where up to a 50% decrease of the USE is reported [46], this temperature effect will not be sufficient to explain such decrease. In that case a possible change of nucleation rate may also be involved in the observed decrease of the USE level. Assuming that only a mode I ductile fracture is prevalent, a larger nucleation rate will lead to an acceleration of the ductile damage, so that the ductile crack will propagate faster resulting in a lower energy for a given temperature. Numerically it has been shown in case of strain controlled nucleation, a decrease of the critical nucleation strain favors shear-type fracture (cup-cone or slant fracture) [59]. Consequently it may be inferred that the change of nucleation rate due to increasing irradiation would lead to larger shear lips on the fracture surface. This change of macroscopic fracture behavior may be linked to the decrease of the USE. Fractographic investigations of irradiated specimens have to be carried out to investigate this hypothesis.

7.3. Simulation of the embrittlement due to irradiation

Irradiation hardens the material causing an increase of the stresses thus causing earlier brittle failure. Considering hypothesis irr. 1, this effect cannot account quantitatively for the whole experimental reference temperature shift $\Delta T_{56J}(\Phi)$. It is therefore necessary to consider that irradiation also affects σ_u and consequently the mean macroscopic cleavage stress. Irradiation effect is then equivalent to “a cooling of the material”, the $\sigma_u(T)$ curve being shifted toward higher temperatures. The micromechanical mechanism needs however to be identified. A first hypothesis which is actually under investigation is the interaction between the irradiation-induced plastic deformation and population of potential nuclei for cleavage.

Using the value of $\sigma_u(T + \Delta T_\phi)$ determined from Charpy data, the shifts of fracture toughness index temperature for different level of hardening corresponding to different level of irradiation were found to be slightly higher than the corresponding shifts obtained from Charpy energy curves. These fracture toughness predictions were found to be in agreement with literature data. The difference decreases with increasing hardening. However it has been checked that the ASME K_{Ic} curve with $\Delta RT_{NDT} = \Delta T_{56J}$ remains a lower bound for the CT(1T) fracture toughness data.

7.4. Effect of the irradiation-induced hardening evolution on the predicted DBT shifts and USE

Assuming hypothesis irr. 2 would have led for a given deflection to smaller stresses and consequently to lower cleavage failure probability. This implies that using σ_u determined for the unirradiated material would have led to a larger underestimation of the DBT shifts. Consequently the conclusion that the mean cleavage stress (i.e. σ_u) is affected by irradiation is valid whatever the chosen hypothesis. This also holds for the actual plastic behavior which is bounded by hypotheses irr. 1 and irr. 2. The computed ΔT_ϕ shown on Fig. 5 would have been larger. Concerning the USE prediction, using hypothesis irr. 2 would not have led to a decrease but to smaller increase. Consequently the conclusion that nucleation may be affected by irradiation is valid.

Acknowledgement

Financial support from Direction de la Sureté des Installations nucléaires (DSIN) and Electricité de France (EdF) is acknowledged.

References

- [1] ASME, ASME Boiler and Pressure Vessel Code, Section XI, Inservice inspection of nuclear power plant, American Society for Mechanical Engineers, 1995.
- [2] Onizawa K, Suzuki M. Comparison of transition temperature shifts between static fracture toughness and Charpy-V impact properties due to irradiation and post-irradiation annealing for Japanese A533B-1 steels. In: Rosinski S, Grossbeck M, Allen T, Kumar A, editors. Effects of radiation on materials: 20th Inter Symp ASTM STP 1405, 2001; p. 79–96.
- [3] Kirk M, Natishan M. Shift in toughness transition temperature due to irradiation: ΔT_0 vs ΔT_{411} , a comparison and rationalization of differences. In: IAEA meeting, specialists meeting on Master Curve testing and results, Prague, Czech Republic, 2001.
- [4] Mathur K, Needleman A, Tvergaard V. 3D analysis of failure modes in the Charpy impact test. Model Simul Mater Sci Engng 1994;2:617–35.
- [5] Tahar M, Tanguy B, Grandjean Y, Piques R. CVN energy and fracture toughness of an A508 steel at low temperature. In: Publishing E, editor. Fracture from defects ECF12, Sheffield, 14–18 September, 1998.
- [6] Schmitt W, Sun D, Bernauer G, Nagel G. New approaches to improve the RPV materials database. Nuc Engng Des 1998;183:1–8.
- [7] Folch L, Burdekin F. Application of coupled brittle-ductile model to study correlation between Charpy energy and fracture toughness values. Engng Fract Mech 1999;63:57–80.
- [8] Needleman A, Tvergaard V. Numerical modeling of the ductile-brittle transition. Int J Fract 2000;101:73–97.
- [9] Rossoll A, Berdin C, Prioul C. Determination of the fracture toughness of a low alloy steel by the instrumented Charpy impact test. Int J Fract 2002;115:205–26.
- [10] Parrot A, Forget P, Dahl A. Evaluation of fracture toughness from instrumented Charpy Impact tests for a reactor pressure vessel steel. In: Proceedings of PVP 2003, Fatigue, Fracture and Damage, Cleveland, Ohio, USA, 2003.
- [11] Tanguy B, Besson J, Piques R, Pineau A. Numerical modeling of Charpy V-notch tests. In: François D, Pineau A, editors. From Charpy to present impact testing, 30.ESIS Publication; 2002. p. 461–8.
- [12] Tanguy B, Besson J, Piques R, Pineau A. Ductile to brittle transition of a A508 steel characterized by the Charpy impact test. Part-II: modeling of the Charpy transition curve. Engng Fract Mech 2005;72/3:413–34.
- [13] Tanguy B, Besson J, Bouchet C, Bugat S. Comparison of predicted transition temperature shifts between static fracture toughness and Charpy-V impact properties due to irradiation for an A508 pressure vessel steel. In: PVP ASME, San Diego, 2004.
- [14] Haggag FM. Effects of irradiation temperature on embrittlement of nuclear pressure vessel steels. In: Kumar AS, Gelles DS, Nanstad RK, Little EA, editors. Effects of Radiation on Materials: 16th Inter Symp ASTM STP 1175, 1993. p. 172–85.
- [15] Kirk M, Santos C, Eason E, Wright J, Odette G. Updated embrittlement trend curve for reactor pressure vessels steels. In: Trans. of the 17th International Conference on Structural Mechanics in Reactor Technology (SMIRT 17)- Prague, Aug 17–22, 2003, p. G01–5.
- [16] Hiranuma N, Soneda N, Dohi K, Ishino S, Dohi N, Ohata H. Mechanistic modeling of transition temperature shift of Japanese RPV materials. In: 30. MPA-Seminar-Stuttgart, 6 and 7 October 2004, 2004.
- [17] Nikolaeva YA, Nikolaeva AV, Shtrombakh YI. Radiation embrittlement of low-alloy steels. Int J Pres Ves Piping 2002;79:619–36.

- [18] Wagenhofer M, Gunawardane HP, Natishan ME. Yield and toughness transition prediction for irradiated steels based on dislocation mechanics. In: Rosinski ST, Grossbeck ML, Allen TR, Kumar AS, editors. Effects of Radiation on Materials: 20th Inter Symp ASTM STP 1045. ASTM; 2001. p. 97–108.
- [19] Brillaud C, Hedin F. In-service evaluation of french pressurized water reactor vessel steel. In: Stoller R, Kumar A, Gelles D, editors. Effects of radiation on materials: 15th Inter Symp ASTM STP, 1125. ASTM; 1992. p. 23–49.
- [20] Trouvain C. Approches globale et locale de la rupture fragile d'un acier faiblement allié. Influence des ségrégations et de l'irradiation, Tech. rep., CEA, Saclay, 1989.
- [21] EDF, Edf industry-nuclear generation division corporate laboratorie, private communication, 2003.
- [22] Margolin B, Gulenko A, Nokolaev V, Ryadkov L. A new engineering method for prediction of the fracture toughness temperature dependence for RPV steels. Int J Pres Ves Piping 2003;80:817–29.
- [23] Al Mundheri M, Soulat P, Pineau A. Irradiation embrittlement of a low alloy steel interpreted in terms of a local approach of cleavage fracture. Fatigue Fract Engng Mater Struct 1989;12(1):19–30.
- [24] Farrell K, Stoller R, Jung P, Ullmaier H. Hardening of ferritic alloys at 288 °C by electron irradiation. J Nucl Mater 2000;279:77–83.
- [25] Byun T, Farrell K. Irradiation hardening behavior of polycrystalline metals after low temperature irradiation. J Nucl Mater 2004;326:86–96.
- [26] Odette G, Yamamoto T, Rathbun H, He M, Hribernik M, Rensman J. Cleavage fracture and irradiation embrittlement of fusion reactor alloys: mechanisms, multiscale models, toughness measurements and implications to structural integrity assessment. J Nucl Mater 2003;323:313–40.
- [27] Byun T, Farrell K. Plastic instability in polycrystalline metals after low temperature irradiation. Acta mater 2004;52:1597–608.
- [28] Parks D. Interpretation of irradiation effects on the fracture toughness of a pressure vessel steel in terms of crack tip stress analysis. J Engng Mater Technol 1976:30–6.
- [29] Tanguy B, Besson J, Piques R, Pineau A. Ductile to brittle transition of an A508 steel characterized by the Charpy impact test. Part-I: experimental results. Engng Fract Mech 2005;72(1):49–72.
- [30] Farrell K, Byun T, Haschimoto N. Deformation mode maps for tensile deformation of neutron-irradiated structural alloys. J Nucl Mater 2004;335:471–86.
- [31] Brillaud C, Grandjean Y, SAILLET S. Vessel investigation program of CHOOZ A PWR reactor after shutdown. In: Rosinski ST, Grossbeck ML, Allen TR, Kumar AS, editors. Effects of Radiation on Materials: 20th Inter Symp ASTM STP 1045. ASTM; 2001. p. 28–40.
- [32] Sokolov M, Nanstad R. Comparison of irradiation-induced shifts of K_{IC} and Charpy impact toughness for reactor pressure vessel steels, Tech. rep., ORNL, NUREG/CR-6609, 2000.
- [33] ASTM-E1921, Standard test method for Determination of reference temperature, T_0 , for ferritic steels in the transition range, ASTM, Philadelphia, USA, 2001.
- [34] Wallin K, Planman T, Valo M, Rintamaa R. Applicability of miniature size bend specimens to determine the master curve reference temperature T_0 . Engng Fract Mech 2001;68:1265–96.
- [35] Tanguy B, Piques R, Laiarinandrasana L, Pineau A. Mechanical behaviour of A508 steel based on double nonlinear viscoplastic constitutive equation. In: Miannay D, Costa P, François D, Pineau A, editors. EUROMAT 2000, Advances in Mechanical Behaviour. Plasticity and Damage. Elsevier; 2000. p. 499–504.
- [36] Tanguy B, Besson J. An extension of the Rousselier model to viscoplastic temperature dependant materials. Int J Fract 2002;116:81–101.
- [37] Tvergaard V. Material failure by void growth to coalescence. Adv Appl Mech 1990;27:83–151.
- [38] Chu C, Needleman A. Void nucleation effects in biaxially stretched sheets. J Engng Mater Technol 1980;102:249–56.
- [39] Zhang X, Knott J. The statistical modelling of brittle fracture in homogeneous and heterogeneous steel microstructures. Acta mater 2000;48:2135–46.
- [40] Beremin F. A local criterion for cleavage fracture of a nuclear pressure vessel steel. Met Trans 1983;14A:2277–87.
- [41] Lefevre W, Barbier G, Masson R, Rousselier G. A modified Beremin model to simulate the warm pre-stress effect. Nuc Engng Des 2002;216:27–42.
- [42] Besson J, Foerch R. Large scale object-oriented finite element code design. Comput Methods Appl Mech Engng 1997;142:165–87.
- [43] AFNOR, Essai de flexion par choc sur éprouvette Charpy. Partie 1: méthode d'essai, Association française de normalisation, La Défense, France, 1990.
- [44] Böhmert J, Viehrig H-W, Ulbricht A. Correlation between irradiation-induced changes of microstructural parameters and mechanical properties of RPV steels. J Nucl Mater 2004;334:71–8.
- [45] Miller M, Pareige P, Burke M. Understanding pressure vessel steels: an atom probe perspective. Mater Charact 2000;44:235–54.
- [46] Gurovich B, Kuleshova E, Shtrombakh Y, Zabusov O, Krasikov E. Intergranular and intragranular phosphorus segregation in Russian pressure vessel steels due to neutron irradiation. J Nucl Mater 2000;279:259–72.
- [47] Kuleshova E, Gurovich B, Shtrombakh Y, Erak D, Lavrenchuk O. Comparison of microstructural features of radiation embrittlement of VVER-440 and VVER-1000 reactor pressure vessel steels. J Nucl Mater 2002;300:127–40.

- [48] Auger P, Pareige P, Welzel S, Van Duysen J-C. Synthesis of atom probe experiments on irradiation-induced solute segregation in French ferritic pressure vessel steels. *J Nucl Mater* 2000;280:331–44.
- [49] Beremin F. Influence de la triaxialité des contraintes sur la rupture par déchirement ductile et la rupture fragile par clivage d'un acier doux. *J de mécanique appliquée* 1980;4(3):327–42.
- [50] Margolin B, Kostylev V. Radiation embrittlement modelling for reactor pressure vessels steels: II. Ductile fracture toughness prediction. *Int J Pres Ves Piping* 1999;76:731–40.
- [51] Faleskog J, Gao X, Shih C. Cell model for nonlinear fracture analysis—I: Micromechanics calibration. *Int J Fract* 1998;89:355–73.
- [52] Faleskog J, Shih C. Micromechanics of coalescence—I. Synergistic effects of elasticity, plastic yielding and multi-size-scale voids. *J Mech Phys Solids* 1996;45(1):21–50.
- [53] Hahn G. The influence of microstructure on brittle fracture toughness. *Met Trans A* 1984;15A:947–59.
- [54] Hunter CW, Williams JA. Fracture and tensile behavior of neutron irradiated A533-B pressure vessel steel. *Nuc Engng Des* 1971;17:131–48.
- [55] Gurovich B, Kuleshova E, Nikolaev Y, Shtrombakh Y. Assessment of relative contributions from different mechanisms to radiation embrittlement of reactor pressure vessel steels. *J Nucl Mater* 1997;246:91–120.
- [56] Bouchet C, Tanguy B, Besson J, Bugat S. Prediction of the effects of neutron irradiation on the Charpy ductile to brittle transition curve of an A508 pressure vessel steel. *Comput Mater Sci* 2005;32:294–300.
- [57] Farrell K, Byun T. Tensile properties of ferritic/martensitic steels irradiated in HFIR, and comparison with spallation irradiation data. *J Nucl Mater* 2003;318:274–82.
- [58] Bordet S, Karstensen A, Knowles D, Wiesner C. A new statistical local criterion for cleavage fracture in steel. Part I: model presentation. *Engng Fract Mech* 2005;72/3:435–52.
- [59] Saje M, Pan J, Needleman A. Void nucleation effects on shear localization in porous plastic solids. *Engng Fract Mech* 1982;19:162–82.

VI. Conclusions - Travaux en cours - Perspectives

VI.1. Conclusions

Les travaux présentés avaient pour objectifs de développer la compréhension et la modélisation des mécanismes de rupture rencontrés dans les aciers et alliages métalliques et de proposer des outils d'interprétation d'essais technologiques complexes utilisés pour la prédiction de l'intégrité et de la durée de vie des composants et des structures métalliques. L'ensemble des études réalisées a été lancé pour répondre à des problématiques industrielles, et les matériaux étudiés sont des matériaux métalliques utilisés dans l'industrie. L'approche choisie se situe dans le cadre de l'approche locale de la rupture, qui repose sur la description des mécanismes physiques de l'endommagement et de la rupture des matériaux. Trois mécanismes de rupture ont été principalement étudiés : la rupture ductile, la rupture fragile et la transition ductile-fragile.

Plusieurs avancées ont été obtenues. L'essai Charpy, utilisé auparavant comme un essai technologique, peut désormais être utilisé pour identifier les paramètres de modèles d'endommagement physiquement fondés et permettre la prévision de la ténacité sur l'acier de cuve. La démarche proposée a montré sa capacité à être appliquée aux aciers fragilisés par l'irradiation neutronique et est maintenant utilisée par les équipes R&D d'EDF. Les courbes de résilience établies pour différents niveaux de fluence jusqu'à 40 ans de durée de fonctionnement ont ainsi été utilisées pour prédire avec succès les données expérimentales de ténacité et la fragilisation avec l'irradiation d'un acier de cuve 16MND5 (Tanguy, 2007)*. La compréhension des mécanismes de déchirure ductile et la modélisation proposée du comportement et de l'endommagement des nouvelles nuances d'aciers hautes résistances (X100) ont permis de développer des outils avec lesquels une propagation de la déchirure ductile sur des distances supérieures à la centaine de mm a été simulée. Aujourd'hui, ces distances simulées sont uniquement limitées par la puissance des outils de calculs disponibles. La problématique de la transférabilité des paramètres de rupture entre éprouvettes et structures, inhérente aux approches utilisées classiquement (J , CTOA⁵⁵) et exacerbée pour ces aciers anisotropes à faible taux d'érouissage, a ainsi pu être traitée. A partir d'essais de laboratoire, on a pu prévoir le taux de dissipation d'énergie R au cours de la propagation d'une déchirure ductile dynamique à des vitesses autour de 40m/s. La démarche proposée devrait donc permettre de prévoir ce paramètre pour différentes nuances de ces aciers et ainsi de pouvoir anticiper la capacité des structures de gazoducs à arrêter la propagation dynamique des fissures.

Au delà de son intérêt pour prédire la fiabilité et la durée de vie pour les structures, l'outil développé a également permis à partir d'études paramétriques, de proposer des modifications potentielles des mécanismes d'endommagement dus à l'irradiation. L'effet de la modification des mécanismes physiques pouvant, à partir des outils développés, être appréhendé à l'échelle de l'éprouvette ou de la structure puis être confronté aux données expérimentales existantes, et ainsi orienter les études expérimentales et théoriques menées à des échelles plus fines.

Au cours des études réalisées, l'expérimentation et la démarche d'identification des paramètres des modèles sont apparues comme deux étapes intimement liées. La réalisation d'expériences où les mécanismes d'endommagement sont représentatifs de ceux rencontrés sur les structures doit être

⁵⁵Pour Crack Tip Opening Angle.

accompagnée dans la mesure du possible de mesures locales quantitatives associées aux différents mécanismes d'endommagement.

Les évolutions notables récentes de l'utilisation de l'approche locale de la rupture concernent les outils numériques pour obtenir les champs mécaniques locaux. La modélisation numérique de l'essai Charpy ne pouvait être raisonnablement abordée qu'en 2,5D et avec une précision de modélisation (taille de maille) limitée en 2001. On utilise aujourd'hui couramment des simulations 3D en élasto-visco-plasticité, intégrant les problèmes fortement non-linéaires du contact. Pour les éprouvettes de ténacité, des simulations 3D avec une description fine de la pointes de fissure sont aujourd'hui réalisées. Parallèlement les moyens d'observation qui permettent d'analyser les mécanismes et donc de proposer une modélisation appropriée ont également fortement progressés (tomographie ESRF, MEB, EBSD, caméra CCD rapide, essai in-situ...) Ces évolutions tant du point de vue expérimental que numérique doivent permettre l'application de la méthodologie de l'approche locale de la rupture à des matériaux industriels de plus en plus complexes.

VI.2. Travaux en cours

Mes travaux actuels s'inscrivent pour partie dans la continuité des travaux précédents, notamment dans la thématique endommagement et rupture des aciers. Nous avons rencontré un certain nombre de difficultés relativement aux modélisations développées quant aux modes de rupture étudiés :

- Pour la rupture ductile :
 - Pour ce qui est des mécanismes, l'importance du rôle de la germination des cavités autour des particules de seconde phase (deuxième population) et des hétérogénéités locales de l'endommagement a été mise en évidence sur les aciers étudiés. Le premier mécanisme joue un rôle de premier ordre dans la rupture en biseau qui se produit à l'amorçage (éprouvette Charpy) et lors de la propagation ductile dynamique sur l'acier X100. L'étude expérimentale du rôle de ce mécanisme à l'échelle de l'élément de volume fait partie de nos travaux en cours (voir ci-dessous). La modélisation de ce mécanisme s'avère difficile et est un sujet de recherche ouvert. Elle passe par l'introduction dans les modèles d'une seconde échelle caractéristique de l'endommagement, associée à la deuxième population. Le deuxième est impliqué dans l'amorçage du clivage dans la transition ductile–fragile. Ce dernier mécanisme jouera également un rôle de premier ordre dans la rupture ductile associée aux éprouvettes dont les dimensions sont du même ordre que la distance caractéristique associée à l'endommagement ductile. Une première piste envisagée est une distribution locale aléatoire de fraction volumique de porosité de façon similaire aux travaux développés par (Devillers-Guerville, 1998; Besson et al., 2000).
- Pour la prévision du clivage dans la transition ductile–fragile :
 - La modélisation de la phase de germination des microfissures de clivage et son introduction explicite dans la modélisation utilisée reste un problème difficile non résolu. Pour les particules de seconde phase comme les carbures de fer dans les microstructures bainitiques, la taille caractéristique, submicronique, et la nature des particules impliquées

sont un obstacle important à la caractérisation expérimentale. Dans un premier temps, l'utilisation de matériaux de "laboratoire" avec des populations d'inclusions contrôlées et avec des distributions de taille et spatiale bien caractérisées devrait permettre des avancées significatives dans la compréhension et la modélisation des mécanismes de clivage.

- Le mécanisme à l'origine de la dépendance apparente de la contrainte de clivage mésoscopique avec la température reste à identifier. Plusieurs pistes ont été avancées dans les études qui ont traité cette problématique mais leur mise en évidence expérimentale n'a pas été validée. L'identification du phénomène physique lui-même reste donc le premier point à traiter. Une première étape est de revenir à des microstructures "simples" tel que la ferrite, pour lesquelles cette dépendance apparente est également observée. Parallèlement, les travaux sur la compréhension des mécanismes de plasticité dans les microstructures complexes telle que la bainite doivent être poursuivis afin de pouvoir proposer une modélisation pour les matériaux industriels.

Parallèlement, des études nouvelles ont été démarrées sur la thématique des effets de l'irradiation et de l'environnement sur le comportement et la rupture des aciers de cuve et des aciers utilisés pour les internes de cuve des réacteurs à eau pressurisée (REP). La première étude (Thèse de S. Cissé, débutée en Novembre 2008) s'intéresse aux effets couplés de l'irradiation et de l'environnement sur la sensibilité à la corrosion sous contrainte (CSC) des aciers inoxydables austénitiques. La deuxième étude (Thèse de X. Han, débutée en Octobre 2009) a pour objectif la modélisation de l'effet du gonflement sur les mécanismes de plasticité des aciers inoxydables austénitiques irradiés.

VI.2.1. Endommagement et rupture ductile

Ces dernières années, l'optimisation des programmes expérimentaux sur les matériaux irradiés a conduit à la miniaturisation des éprouvettes. Certaines mini-éprouvettes ont des dimensions qui sont du même ordre de grandeur que certaines longueurs caractéristiques de la microstructure. De plus, pour certains matériaux (cas des aciers de cuve), plusieurs populations de particules avec des distributions de taille et spatiale très différentes sont impliquées dans le processus de rupture ductile. Les modélisations couramment utilisées, qui ont intrinsèquement une dépendance au maillage, relient la taille de maille à la longueur caractéristique représentative de la population qui va être active la première, les sulfures de manganèse dans le cas de l'acier de cuve. Ce type de modèles ne permet pas de décrire finement les phénomènes qui ont lieu à l'échelle spatiale de la deuxième population d'inclusions, ni la compétition entre les deux échelles de localisation. On voit donc que la problématique de la rupture ductile, notamment de la transférabilité des grandeurs mécaniques issues des essais sur éprouvettes miniatures aux structures reste entière.

Une première étude, initiée lorsque j'étais au Centre des Matériaux en collaboration avec J. Besson, est en cours sur l'acier de cuve 16MND5, elle s'intéresse aux effets d'échelle. Ce type de matériau possède trois populations de particules impliquées dans la rupture ductile : les sulfures de manganèse (MnS) allongés avec une taille moyenne de l'ordre de la trentaine de microns, les MnS arrondis avec un diamètre moyen de l'ordre de 4 microns et les carbures de fer avec une taille moyenne submicronique. L'étude est basée sur des essais de traction sur des éprouvettes de traction lisses et entaillées (NT) homothétiques. Pratiquement, les diamètres varient d'un facteur 8, passant de 6 mm à 0.7 mm (fig. 40).

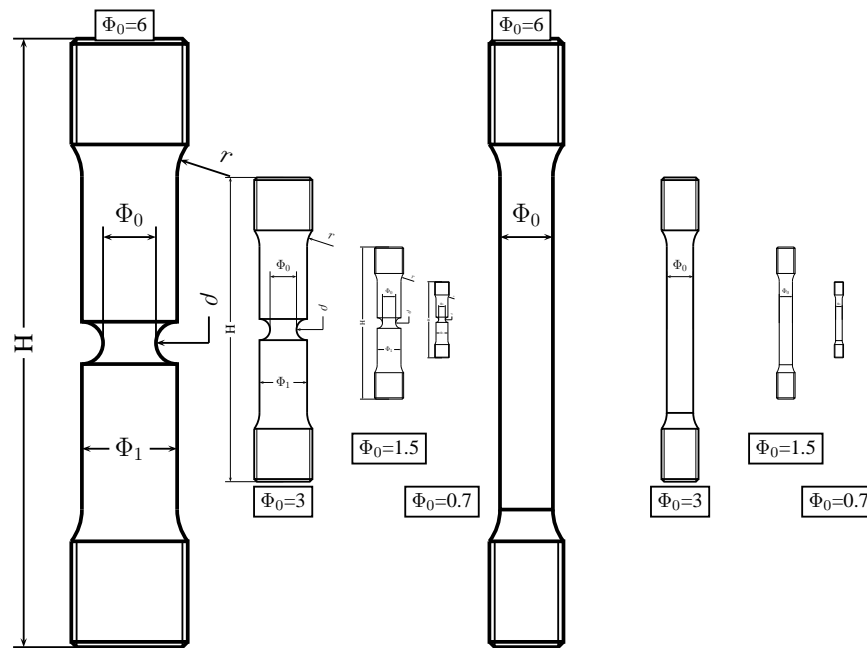


Figure 40: Dimensions relatives des éprouvettes de traction lisse et NT utilisées pour étudier les effets d'échelle de la rupture ductile de l'acier 16MND5.

Les essais sont réalisés à la température ambiante. Deux résultats sont aujourd'hui obtenus pour les deux types d'éprouvettes : la dispersion des charges maximales augmente quand la taille de l'éprouvette diminue, la réduction diamétrale à la chute rapide de charge diminue avec l'augmentation de la taille de l'éprouvette. L'examen de l'aspect du faciès de rupture montre que celui-ci dépend du diamètre de l'éprouvette. Un faciès de type "cup-cone" est toujours obtenu mais la fraction relative de la partie centrale plate par rapport à la rupture en biseau diminue avec la taille de l'éprouvette (figure 41).

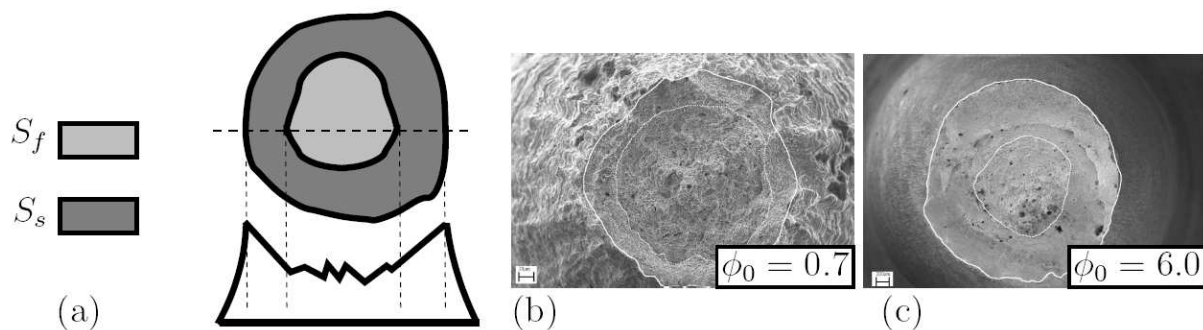


Figure 41: Illustration de l'effet d'échelle en déchirure ductile. Essais de traction sur l'acier 16MND5(2). a) illustration de la détermination des surfaces pour chaque type de rupture, S_f : surface projetée avec rupture plate, S_s : surface projetée avec rupture en biseau, b) et c) Faciès de rupture d'éprouvettes de traction lisses, avec $\Phi_0=0.7$ et 6.0 mm, respectivement.

La modification de la forme du faciès de rupture avec la taille de l'éprouvette et une illustration de la distribution hétérogène des sulfures de manganèse sont montrées sur la figure 42.

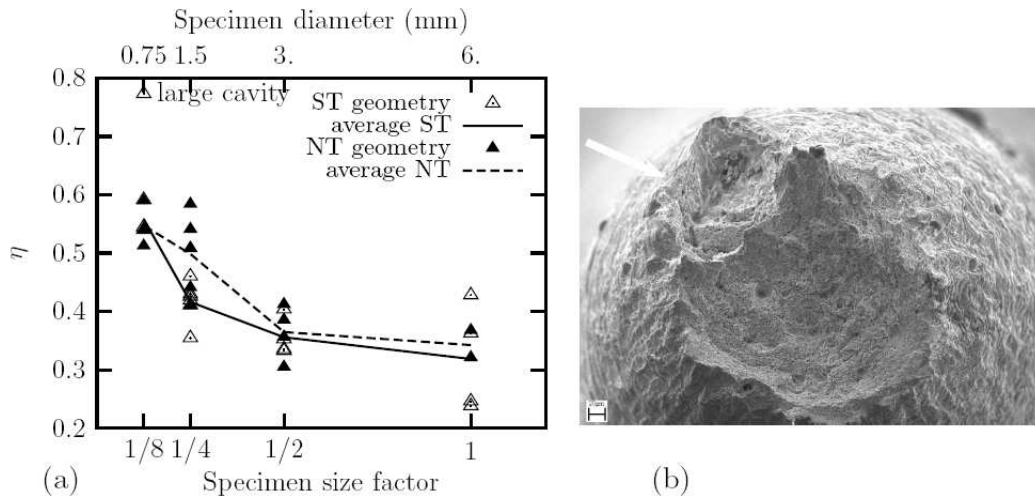


Figure 42: a) Variation de $\eta = S_f / (S_f + S_s)$ avec le diamètre de l'éprouvette où S_f est l'aire centrale sur le faciès, S_s est l'aire périphérique à 45° sur le faciès. b) Illustration de l'hétérogénéité spatiale des MnS : large cavité ductile autour d'un MnS éliminé, en périphérie du faciès de rupture.

Une modélisation a été conduite en utilisant une taille de maille constante pour toutes les géométries. Elle permet de reproduire, d'une part, la forme en *cup-cone* du faciès et son développement en fonction du diamètre Φ_0 ; celle-ci est favorisée pour les grosses éprouvettes (Φ_0 important) et, d'autre part, une propension plus grande à la rupture plate pour les NT que pour les éprouvettes lisses pour un diamètre fixé, en accord avec les expériences. Elle ne peut cependant pas reproduire le fait qu'une région en biseau est toujours présente, même pour les petites éprouvettes. Une explication possible est l'existence d'une longueur caractéristique liée aux carbures de fer et qui pilote le processus d'endommagement dans les régions de faibles triaxialités. Les perspectives de ce travail sont, d'une part, l'introduction d'une seconde échelle caractéristique dans la modélisation de l'endommagement ductile et, d'autre part, l'introduction des hétérogénéités spatiales de fraction volumique de particules dans les simulations. Dans ce dernier cas, la méthodologie développée dans (Besson et al., 2000) sera suivie.

Une deuxième étude a été lancée avant mon arrivée au CEA, en collaboration avec E. Maire (MATEIS INSA Lyon), sur la compréhension du développement de l'endommagement ductile volumique pour les aciers de structure. Une proposition d'étude a été acceptée en ce sens à l'ESRF de Grenoble et la campagne de mesures a été réalisée (Post-Doc S. Billard (Billard et al., 2007)*). L'exploitation en est actuellement en cours. Dans cette étude, on souhaite étudier la germination des cavités autour des inclusions ou leur fissuration par clivage afin d'établir des cinétiques de germination des cavités. Les objectifs sont multiples : (i) montrer qualitativement une relation entre le processus de germination et une population d'inclusions, (ii) déterminer un critère de germination fonction de la nature des inclusions en s'appuyant sur des simulations par éléments finis, (iii) étudier l'effet de la triaxialité des contraintes sur la germination, et (iv) proposer une loi de germination statistique pour une population d'inclusions donnée.

Deux aciers issus de coulées de laboratoire sont utilisés, le premier est calmé au Ti et le second est

calmé à l'aluminium. Ces deux aciers ont été élaborés en raison de leurs populations d'inclusions très différentes en nature (TiO_2 et MnS multiphasé), en fraction volumique et en distribution de taille. Des traitements thermiques ont été réalisés pour obtenir une matrice identique pour les deux aciers afin de ne pas biaiser les résultats des observations. Deux types d'expérience ont été réalisés : (i) des essais en laboratoire, interrompus à différents niveaux du développement de l'endommagement sur des éprouvettes entaillées avec différents niveaux de triaxialité. Des batons de dimensions $0.4 \times 0.4 \times 10 \text{ mm}^3$ ont été prélevés à différentes positions dans le volume, et sont ensuite "scannés" au tomographe de l'ESRF, (ii) des essais de traction in-situ au tomographe de l'ESRF sur des éprouvettes plates lisses et entaillées avec deux rayons d'entaille de sections minimales $0.6 \times 0.6 \text{ mm}^2$. La figure 43 illustre la méthodologie employée à l'ESRF et un premier résultat issu du dépouillement des scans. Une courbe de traction sur une éprouvette entaillée est illustrée sur la figure 43a. Les décharges observées correspondent à la relaxation du matériau pendant le scan par le tomographe. Une vue de l'endommagement volumique au cours d'un essai de traction in-situ est montrée sur la figure 43b.

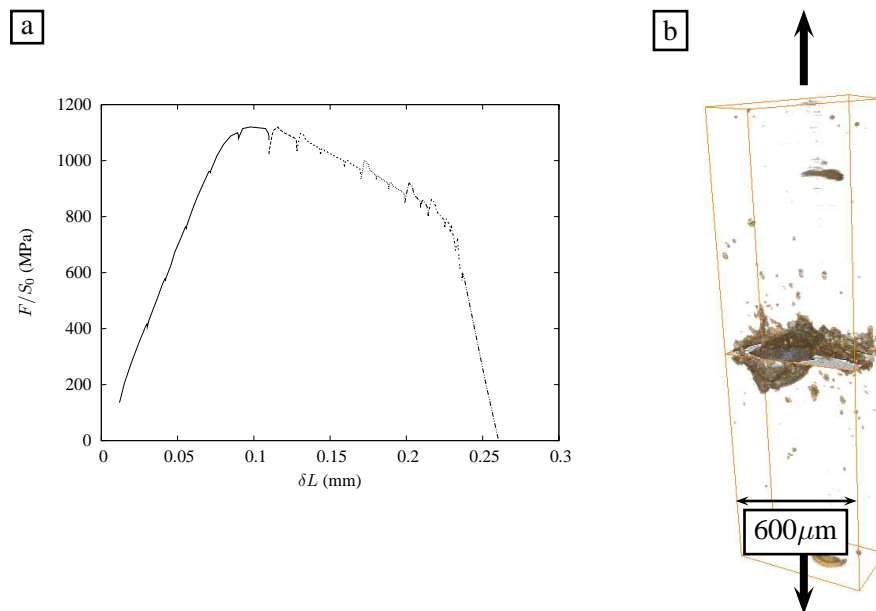


Figure 43: Campagne d'essais au tomographe de l'ESRF pour l'étude sur la germination des cavités (aciers bainitiques de structure). a) courbe de traction in-situ sous faisceau RX sur éprouvette de traction entaillée, b) visualisation du développement de l'endommagement ductile volumique pendant un essai de traction in-situ sur éprouvette de traction lisse.

VI.2.2. Rupture par clivage

Nos travaux en cours sur ce thème sont orientés vers une meilleure modélisation des mécanismes physiques du clivage. En parallèle, des travaux sont menés au CEA sur la plasticité cristalline dans les bainites afin d'appréhender les effets sur le clivage des hétérogénéités de déformation plastique qui conduisent à une distribution statistique spatiale des contraintes.

Les résultats de nos études, validés par d'autres équipes de recherche, ont conduit à introduire une dépendance phénoménologique d'un paramètre du modèle de Beremin vis-à-vis de la température dans

la partie supérieure de la transition ductile–fragile. La capacité de la méthodologie proposée à être utilisée pour prédire des essais à des vitesses de sollicitations différentes de ceux qui ont servis pour déterminer les paramètres des modèles et à prédire la ténacité sur matériaux, non-irradiés et irradiés à différents niveaux de fluence, conforte son transfert vers la R&D de l'industrie en support aux analyses par l'approche globale de la rupture. Cependant il est important de poursuivre les recherches sur cette thématique afin d'introduire une base physique complémentaire dans la modélisation et ainsi fournir des prédictions robustes.

Pour ce qui est de mes travaux, deux voies sont actuellement suivies parallèlement : (i) la poursuite des investigations pour l'identification des mécanismes physiques, (ii) l'amélioration de la description des champs mécaniques locaux pour l'étude du préchargement à chaud (WPS).

L'hypothèse de l'évolution de la barrière microstructurale avec la température, avancée par (Martín-Meizoso et al., 1994) pour les aciers bainitiques, est examinée dans le stage de Master de X. Li. Une première approche basée sur l'utilisation de l'émission acoustique avait été tentée pendant mes travaux au Centre des Matériaux. Nous nous étions heurtés au bruitage du signal induit par la machine d'essai et par le système de refroidissement à l'azote. Une autre approche est donc suivie : celle utilisée dans les travaux de Chen (Wang and Chen, 2001) sur les aciers ferrito-perlitiques. Elle s'appuie sur la métallurgie 3D développée dans les études pionnières sur le clivage. Des éprouvettes doublement entaillées en acier 16MND5 sont testées en flexion 4 points à des températures croissantes conduisant à la rupture finale par clivage. Lors de la rupture, la zone sous l'entaille non rompue a vu un chargement identique à celle qui a rompu. On effectue donc plusieurs coupes longitudinales de cette zone (découpe en tranches) et on recherche la présence de fissures de clivage arrêtées.

L'application d'un critère de rupture en contrainte tels que ceux utilisés couramment dans l'approche locale de la rupture est fortement dépendante de la validité des champs mécaniques locaux à l'échelle de l'élément de volume. L'hypothèse d'une description insuffisante de ces champs mécaniques comme cause de l'échec de la prédiction du cycle LUCF (Load-Unload-Cooling-Fracture) est examinée dans le stage de Master de N. Mozzani. L'évolution de la surface de charge à basse température après une déformation à la température ambiante est étudiée à partir d'essais de traction–torsion. La méthodologie utilisée est inspirée de celle développée par V. Aubin (Aubin, 2008) sur les aciers inoxydables austéno-ferritiques pour déterminer les surfaces de charge à différents niveaux de déformation plastique à partir d'une seule éprouvette. Par ailleurs, le comportement cyclique de l'acier 16MND5 est étudié par des essais de traction-compression.

VI.3. Perspectives

Mon intégration au Département des Matériaux pour le Nucléaire oriente mes travaux de recherche en vue de répondre aux besoins spécifiques rencontrés lors de la réalisation d'essais mécaniques sur matériaux irradiés et à leur interprétation. Le coût, la durée des irradiations expérimentales ainsi que la rareté des essais mécaniques sur matériaux irradiés doivent nous conduire à proposer des essais instrumentés plus riches en informations qui, couplés à des outils numériques, permettront l'interprétation des mécanismes d'endommagement dus à l'irradiation.

L'approche envisagée sera dans la continuité des études menées à ce jour. Les futures études envisagées reposent sur :

- le développement d'expérimentations permettant d'identifier à une échelle locale les paramètres des modèles d'endommagement et leur évolution,
- le développement de méthodologies adaptées pour interpréter les essais sur matériaux irradiés,
- une meilleure modélisation des mécanismes physiques observés sur ces matériaux.

VI.3.1. Endommagement et rupture ductile

Une première problématique, propre aux essais sur matériaux irradiés, que nous continuerons à investiguer est celle relative aux essais sur éprouvettes miniaturisées et à leur interprétation. Nous avons montré que lorsque les dimensions des éprouvettes sont proches des longueurs caractéristiques des mécanismes d'endommagement ductile, les aspects de la germination autour des particules, et ceux de la prise en compte de l'hétérogénéité de la distribution des inclusions de type MnS étaient particulièrement important. Une deuxième problématique est celle de la modélisation de la rupture ductile des aciers de cuve irradiés afin de mieux prévoir le plateau ductile obtenu à partir de l'essai Charpy. Les cinétiques de l'endommagement ductile sont modifiées par les mécanismes de localisation favorisés par l'irradiation. Une troisième problématique associée est celle de l'influence du vieillissement dynamique sur la ténacité à l'amorçage $J_{0,2}$ de l'acier de cuve, qui fonctionne en service à une température où ce phénomène est présent (Amar-Haioun, 1985). L'étude de l'effet de cette localisation sur l'endommagement ductile est envisagée à partir des travaux développés dans la thèse de M. Mazière (Mazière, 2007)* sur la modélisation de la localisation plastique en bandes de coalescence. L'étude de l'effet de ces bandes de coalescence sur la croissance d'une cavité permettra de mettre en évidence rapidement si cet effet est significatif ou non.

VI.3.2. Rupture par clivage

Une meilleure compréhension des mécanismes du clivage reste une problématique incontournable pour nombre de secteurs industriels, et notamment celui de l'électronucléaire. Nous poursuivrons donc nos travaux sur ce thème. Il ne s'agit pas pour nous de proposer des modélisations cristallines ou de dynamique des dislocations à l'échelle de la structure. Des modélisations à l'échelle du cristal et des groupes de dislocations sont actuellement développées par d'autres chercheurs au CEA et nous en suivons les résultats avec intérêt. Elles devraient proposer une interprétation physique et permettre d'identifier les évolutions, à l'échelle pertinente, des paramètres phénoménologiques utilisés dans les modélisations mésoscopiques actuelles.

A court terme, un autre aspect à explorer est la germination des microfissures de clivage. L'identification d'un critère de germination sur particules sous sollicitations multiaxiales est un des axes envisagés. L'évolution des modèles actuels doit être envisagée par la description statistique de la germination des microfissures couplée à la description statistique des hétérogénéités des champs mécaniques locaux. Cependant un raffinement trop poussé des modélisations actuelles par l'introduction d'une description exhaustive de la microstructure ne nous semble pas une voie envisageable industriellement.

VI.3.3. Comportement des matériaux irradiés

Compte tenu des coûts associés aux irradiations aux neutrons, des difficultés associées à la réalisation des essais mécaniques sur les matériaux irradiés aux neutrons, et des essais standards (traction monotone, résilience et ténacité) sur lesquels sont basés les programmes de surveillance, peu d'essais mécaniques permettant d'alimenter une modélisation enrichie du comportement des aciers de cuve et des Internes de cuve ont été réalisés à ce jour. Un enrichissement des lois de comportement utilisées pour décrire le comportement des aciers de cuve irradiés est nécessaire. Par exemple, dans le cadre de la prévision de la ténacité après un préchargement à chaud (WPS), la réalisation d'essais permettant la détermination de l'érouissage cinématique sur les aciers de cuve irradiés, nous apparaît comme une voie d'amélioration. Cette démarche originale a été suivie lorsque nous avons élaboré en partenariat avec EDF et AREVA, un nouveau programme d'irradiation en réacteur expérimental (réacteur Osiris à Saclay), où des éprouvettes NT ont été retenues pour être placées dans le dispositif d'irradiation.

VI.3.4. Problématique des internes de cuve

En ce qui concerne les internes de cuve et leur sensibilité à l'IASCC (Irradiation Assisted Stress Corrosion Cracking), une première étape majeure est la modélisation prédictive de la corrosion sous contrainte des aciers inoxydables austénitiques, qui reste entièrement à développer. Soulignons que les problèmes liés à la corrosion (par piqûres ou sous contraintes) sont ceux qui sont actuellement les plus pénalisants dans l'industrie électronucléaire et dans de nombreuses autres industries (chimie, transport de l'énergie). Les approches développées à ce jour sont entièrement phénoménologiques. L'intérêt récent de la communauté des mécaniciens des matériaux pour la corrosion sous contrainte (CSC) des aciers inoxydables doit apporter un regard nouveau et complémentaire à celui de la communauté des chimistes sur cette thématique.

La disparité des échelles des phénomènes et les couplages multiphysiques restent un point dur dans le développement de la modélisation. Dans le cas de la CSC des matériaux inoxydables austénitiques irradiés, notre approche est pragmatique. Dans un premier temps, elle vise à identifier les phénomènes prépondérants et à développer les moyens pour les représenter dans un calcul de structure. Cette étape repose sur l'expérimentation, que nous envisageons d'une part avec l'utilisation de l'irradiation aux protons, qui permet de manipuler des matériaux irradiés non-activés, et d'autre part en développant une instrumentation plus fine des essais sur matériaux irradiés aux neutrons. De plus, l'effet de l'énergie de faute d'empilement (EFE) sur les mécanismes de localisation plastique et sur la CSC est un autre axe envisagé à court terme, par l'utilisation de matériaux avec différents teneurs en silicium, élément d'alliage qui diminue l'EFE. Cette étude est menée dans le cadre de la thèse de S. Cissé en collaboration avec le LECA (laboratoire d'étude de la corrosion aqueuse) au CEA et le CIRIMAT (ENCIACET) à Toulouse. A la suite de ces investigations expérimentales, l'utilisation des simulations par éléments finis est envisagée pour appréhender les interactions entre les différents phénomènes. L'échelle cristalline nous semble la plus appropriée. La représentation actuelle de la CSC par la communauté des chimistes est intimement liée à un process stochastique⁵⁶. On peut cependant raisonnablement penser que l'aspect

⁵⁶L'endommagement par des mécanismes telle que l'oxydation surfacique est intimement lié aux interactions électrochimiques avec les premières couches atomiques d'un matériau élaboré par un process industriel !

polycristallin du matériau, notamment par les hétérogénéités spatiales de contrainte et de déformation, est à l'origine d'une partie des dispersions observées (Trethewey et al., 2008; Kamaya and Itakura, 2009). Cet aspect peut être aujourd'hui traité par les modélisations d'agrégats à l'échelle de la plasticité cristalline. Ces études sont envisagées en collaboration avec M. Sauzay au CEA/DMN/SRMA, qui développe des travaux sur le chargement mécanique des joints de grains, dû aux bandes de localisation de la déformation plastique observées dans les internes irradiés, et avec S. Forest et J. Besson du Centre des Matériaux qui développent des travaux sur la propagation de fissures pilotée par un mécanisme de diffusion dans les agrégats polycristallins.

VI.3.5. Conclusions

L'aboutissement de la démarche proposée se trouve dans le développement de méthodologies physiquement fondées qui permettront aux industriels de faire des choix entre différents matériaux dont le comportement à rupture, notamment vis à vis de l'irradiation, doit être appréhendé sur une échelle de 50 ans et plus⁵⁷. Cette démarche est partagée par un grand nombre de mes collègues au Département des Matériaux pour le Nucléaire.

Une partie des études détaillées dans ce mémoire a traité de la fragilisation par irradiation des aciers utilisés dans la génération II (REP) des réacteurs nucléaires. Soulignons que pour la génération III (EPR), les niveaux d'irradiation vus par la cuve seront beaucoup plus faibles, ce qui limitera les problèmes de fragilisation dû à l'irradiation de l'acier de cuve. Cependant ces réacteurs étant conçus pour une durée de vie beaucoup plus longue, les aciers utilisés risquent d'être confrontés à du vieillissement thermique qui se traduit par des phénomènes de rupture intergranulaire. L'étude de la ségrégation aux interfaces caractéristique de ce phénomène sur matériaux irradiés est particulièrement délicate, et passe par le développement de dispositifs tel que la microsonde Auger in-situ.

Enfin, la Direction de l'Energie Nucléaire dont dépend le Département des Matériaux pour le Nucléaire, doit faire face à trois nouveaux grands enjeux dans les prochaines années : le développement de la génération IV des réacteurs nucléaires, le démantèlement des réacteurs nucléaires de première génération et le stockage des déchets radioactifs à durée de vie longue. Les réponses à ces trois enjeux passent en partie par l'élaboration, la caractérisation et la compréhension du comportement et de l'endommagement de matériaux tels que les verres pour le stockage, les aciers ODS (Oxyde Dispersion Stengthened steels) comme solution possible pour le gainage du combustible de la génération IV ou le graphite irradié pour le démantèlement des réacteurs graphite-gaz. Les défis associés aux matériaux *industriels* pour le nucléaire sont nombreux et ouvrent de vastes perspectives de recherche en fiabilité mécanique des matériaux.

⁵⁷Rappelons que les choix matériaux effectués pour les REP reposaient sur une durée de fonctionnement de 30 ans, on envisage aujourd'hui une prolongation de la durée de fonctionnement au delà de 50 ans. Pour l'EPR, la durée de fonctionnement de conception est au moins de 60 ans.

Références

- AFNOR-10045-1 (1990). *Essai de flexion par choc sur éprouvette Charpy. Partie 1 : méthode d'essai*. Association française de normalisation, La Défense, France.
- AFNOR-10045-2 (1992). *Essai de flexion par choc sur éprouvette Charpy. Partie 2 : Vérification de la machine d'essai*. Association française de normalisation, La Défense, France.
- Alexander, J. and Komoly, T. (1962). On the yielding of a rigid/plastic bar with an Izod notch. *J. Mech. Phys. Solids*, 10:265–275.
- Alexandre, F. (2006). *Aspects probabilistes et microstructuraux de l'amorçage des fissures de fatigue dans l'alliage INCO 718*. PhD thesis, Mines Paris.
- Amar-Haioun, E. (1985). *Application de l'approche locale de la rupture à l'étude de la transition ductile–fragile dans l'acier 16MND5*. PhD thesis, Ecole des Mines de Paris.
- Argon, A., Im, J., and Safoglu, R. (1975). Cavity formation from inclusions in ductile fracture. *Met. Trans. A*, 6A:825–837.
- ASTM-E1921 (2001). *Standard test method for Determination of reference temperature, T_0 , for ferritic steels in the transition range*. ASTM, Philadelphia,USA.
- ASTM-E23 (1992). *Standard test methods for notched bar impact testing of metallic materials*. American Society for Testing and Materials, Philadelphia,USA.
- Aubin, V. (2008). *Dialogue Modèle-Expérience en fatigue oligocyclique des aciers inoxydables*. PhD thesis, Laboratoire de Mécanique de Lille (UMP 8107), Habilitation à Diriger les Recherches soutenue le 10 décembre à l'Ecole Centrale de Lille.
- Auger, P., Pareige, P., Welzel, S., and Van Duysen, J.-C. (2000). Synthesis of atom probe experiments on irradiation-induced solute segregation in French ferritic pressure vessel steels. *J. Nuclear Materials*, 280:331–344.
- Barsom, J. and Rolfe, S. (1970). Correlations between K_{Ic} and Charpy V-notch test results in the transition–temperature range. In for Testing, A. S. and Materials, editors, *Impact testing of metals*, pages 281–302. ASTM STP 466.
- Basu, S. and Narasimhan, R. (1999). A finite element study of the effects of material characteristics and crack tip constraint on dynamic ductile fracture initiation. *J. of the Mechanics and Physics of Solids*, 47:325–350.

- Becker, R., Needleman, A., Richmond, O., and Tvergaard, V. (1988). Void growth and failure in notched bars. *J. Mech. Phys. Solids*, 36:317–351.
- Benzerga, A. (2000). *Rupture ductile des tôles anisotropes. Simulation de la propagation longitudinale dans un tube pressurisé*. PhD thesis, Ecole des Mines de Paris.
- Benzerga, A., Besson, J., and Pineau, A. (1999). Coalescence-controlled anisotropic ductile fracture. *J. Eng. Mat. Technology*, 121:221–229.
- Benzerga, A. and Besson, J. and Pineau, A. (2004a). Anisotropic ductile fracture. Part I: experiments. *Acta mater.*, 52:4623–4638.
- Benzerga, A. and Besson, J. and Pineau, A. (2004b). Anisotropic ductile fracture. Part I: theory. *Acta mater.*, 52:4639–4650.
- Berdin, C. and Hausild (2002). Damage mechanism and local approach to fracture, part.I, Ductile fracture. In Dlouhý, I., editor, *Transferability of fracture mechanical characteristics*, pages 167–180. Kluwer academics publishers.
- Beremin, F. (1980). Influence de la triaxialité des contraintes sur la rupture par déchirement ductile et la rupture fragile par clivage d'un acier doux. *Journal de mécanique appliquée*, 4(3):327–342.
- Beremin, F. (1981). Cavity formation from inclusions in ductile fracture of A508 steel. *Met. Trans.*, 12A:723–731.
- Beremin, F. (1983). A local criterion for cleavage fracture of a nuclear pressure vessel steel. *Met. Trans.*, 14A:2277–2287.
- Bernauer, G., Brocks, W., and Schmitt, W. (1999). Modifications of the Beremin model for cleavage fracture in the transition region of a ferritic steel. *Engng Fract Mech*, 64:305–325.
- Besson, J., Devillers-Guerville, L., and Pineau, A. (2000). Modeling of scatter and size effect in ductile fracture : Application to thermal embrittlement of duplex stainless steels. *Engng Fract Mech*, 67(2):169–190.
- Besson, J., Steglich, D., and Brocks, W. (2001). Modeling of crack growth in round bars and plane strain specimens. *Int. J. Solids Structures*, 38(46-47):8259–8284.
- Besson, J., Steglich, D., and Brocks, W. (2003). Modeling of plane strain ductile rupture. *Int. J. Plasticity*, 19:1517–1541.
- Billard, S., Gourgues-Lorenzon, A.-F., and Tanguy, B. (2007). Effet d'une population contrôlée d'inclusions sur la transition ductile-fragile en ténacité d'aciers. Technical report, Rapport final, janvier, Centre des Matériaux, ENSMP.
- Bordet, S., Karstensen, A., Knowles, D., and Wiesner, C. (2005). A new statistical local criterion for cleavage fracture in steel. part i: model presentation. *Engng Fract Mech*, 72/3:435–452.

- Bordet, S., Tanguy, B., Besson, J., Bugat, S., Moinereau, D., and Pineau, A. (2006a). Cleavage fracture of a RPV steel following warm pre-stressing: micromechanical analysis and interpretation through a new model. *Fatigue Fract Engng Mater Struct*, 29(9/10):799–816.
- Bordet, S., Tanguy, B., Bugat, S., Moinereau, D., and Pineau, A. (2006b). Cleavage fracture micromechanism related to WPS effect in RPV steel. In *ECF 16, Failure analysis of Nano and Engineering Materials and Structures*, Alexandroupolis, Greece.
- Bouchet, C. (2004). Extension de l'approche locale de la rupture dans le domaine de la transition ductile-fragile pour l'acier de cuve. Technical report, Rapport d'avancement No. 1592-2A, CDM, ENSMP.
- Bouchet, C., Arnoldi, F., Besson, J., Degallaix, S., Denner, V., Desplanques, Y., Diard, O., Espinasse, G., Forget, P., Hausild, P., Maire, E., I., N., Rabeau, V., Tanguy, B., and Verdu, C. (2005a). Benchmark on the determination of the cleavage triggering sites in a RPV steel in the DBT range. In *11 th International Conference on Fracture*, Turin, Italy.
- Bouchet, C., Tanguy, B., Besson, J., and Bugat, S. (2003). Prediction of the effects of neutron irradiation on the Charpy ductile to brittle transition curve of an A508 pressure vessel steel. In *IWCMM 13*, Magdeburg.
- Bouchet, C., Tanguy, B., Besson, J., and Bugat, S. (2005b). Prediction of the effects of neutron irradiation on the Charpy ductile to brittle transition curve of an A508 pressure vessel steel. *Comp. Mat. Science*, 32:294–300.
- Bouchet, C., Tanguy, B., Besson, J., and Pineau, A. (2007). Extension de l'approche locale de la rupture dans le domaine de la transition fragile-ductile. application au cas du programme de surveillance des aciers de cuve des centrales nucléaires francaises. Technical report, Rapport final, Février, Centre des Matériaux, ENSMP.
- Bouchet, C., Tanguy, B., Besson, J., Pineau, A., and Bugat, S. (2006a). Transferability of cleavage fracture parameters between notched and cracked geometries. In *ECF 16, Failure analysis of Nano and Engineering Materials and Structures*, Alexandroupolis, Greece.
- Bouchet, C., Tanguy, B., Besson, J., Pineau, A., and Bugat, S. (2006b). Transferability of cleavage fracture parameters between notched and cracked geometry. In *ECF 16, Failure analysis of Nano and Engineering Materials and Structures*, Alexandroupolis, Greece.
- Bouyne, E., Flower, H., Lindley, T., and Pineau, A. (1998). Use of EBSD technique to examine microstructure and cracking in a bainitic steel. *Scripta Materialia*, 39(3):295–300.
- Bouyne, E., Joly, P., Houssin, B., Wiesner, C., and Pineau, A. (2001). Mechanical and microstructural investigations into the crack arrest behaviour of a modern 2 1/4 Cr–1 Mo pressure vessel steel. *Fatigue Fract Engng Mater Struct*, 24:105–116.
- Bowen, P., Druce, S., and Knott, J. (1986). Effect of microstructure on cleavage fracture in pressure vessel steel. *Acta metall.*, 34:1121–1131.

- Brocks, W., D.Z., S., and Höning, A. (1996). Verification of micromechanical models for ductile fracture by cells model calculations. *Comp. Mat. Sc.*, 7:235–241.
- Brocks, W., Klingbeil, D., Kunecke, G., and Sun, D. (1995). Application of the Gurson model to ductile tearing resistance. In Kirk, M. and Bakker, A., editors, *Constraint effects in fracture theory and applications : Second volume*, pages 232–252. ASTM STP 1244.
- Bron, F. and Besson, J. (2004). A yield function for anisotropic materials. Application to aluminium alloys. *Int. J. of Plasticity*, 20:937–963.
- Brozzo, P., Buzzichelli, G., Mascanzoni, A., and Mirabile, M. (1977). Microstructure and cleavage resistance of low-carbon bainitic steels. *Metal Science*, 11:123–129.
- Carassou, S. (2000). *Déclenchement du clivage dans un acier faiblement allié : rôle de l'endommagement ductile localisé autour des inclusions*. PhD thesis, Ecole des Mines de Paris.
- Chaouadi, R., De Meester, P., and Scibetta, M. (1996). Micromechanical modeling of ductile fracture initiation to predict fracture toughness of reactor pressure vessel steels. *Journal de physique IV*, 6:C6-53-C6-64.
- Chapuliot, S. and Le Corre, V. (2008). A simplified expression for low cleavage probability calculations. *Engng Fract Mech*, 75:1488–1506.
- Charpy, G. (1901). Note sur l'essai des métaux à la flexion par choc de barreaux entaillés. *Mémoires et comptes rendu de la société des ingénieurs civils de France*, pages 848–877.
- Chen, J., Wang, C., Yan, C., and Zhu, L. (1997). Advances in the mechanism of cleavage fracture of low alloy steel at low temperature. Part I: critical event. *Int J Frac*, 83:105–120.
- Chu, C. and Needleman, A. (1980). Void nucleation effects in biaxially stretched sheets. *J Engng Mater Technology*, 102:249–256.
- Curry, D. and Knott, J. (1976). The relationship between fracture toughness and microstructure in the cleavage fracture of mild steel. *Metal Science*, pages 1–6.
- Devillers-Guerville, L. (1998). *Rupture d'aciers inoxydables austéno-ferritiques moulés, fragilisés par vieillissement à 350–400° C: Aspect microstructuraux — Simulation numérique de la dispersion et des effets d'échelle*. PhD thesis, Ecole des Mines de Paris.
- Di Fant, M., Genty, A., and Pineau, A. (1990). Thermal-shock-induced crack arrest of two low-alloy steels. *High temperature Technology*, 8:105–114.
- Druce, G. (1986). Effect of austenitisation heat treatment on the fracture resistance and temper embrittlement of manganium steels. *Acta metall.*, 34:219–232.
- Druce, S., Gibson, G., and Capel, M. (1992). Microstructural control of cleavage fracture in an A508 steel class 3 pressure vessel steel. In Ernst, H., Saxena, A., and McDowell, D., editors, *Fracture Mechanics : Twenty second symposium (Volume I)*, pages 682–706. ASTM STP 1131.

- ESIS (1997). Draft procedure to measure and calculate local approach criteria using notched tensile specimens. European Structural Integrity Society, TC1.1, Draft DOC. V4.0.
- ESIS (2000). Numerical round robin on micro-mechanical models. Technical report, European Structural Integrity Society, TC8.
- Evans, A. (1983). Statistical aspects of cleavage fracture in steel. *Met. Trans.*, 14A:1349–1355.
- Fairchild, D., Howden, D., and Clark, W. (2000a). The mechanisms of brittle fracture in a microalloyed steel: Part I. Inclusion-induced cleavage. *Met. and Mat. Trans. A*, 31A:641–652.
- Fairchild, D., Howden, D., and Clark, W. (2000b). The mechanisms of brittle fracture in a microalloyed steel: Part II. Mechanistic-modelling. *Met. and Mat. Trans. A*, 31A:653–667.
- Faleskog, J., Gao, X., and Shih, C. (1998). Cell model for nonlinear fracture analysis—I: Micromechanics calibration. *Int. J. of Fract.*, 89:355–373.
- Faleskog, J., Kroon, M., and Öberg, H. (2004). A probabilistic model for cleavage fracture with a length scale—Parameter estimation and predictions of stationary crack experiments. *Engng Fract Mech*, 71:57–79.
- Forget, P., Marini, B., Parrot, A., and Todeschini, P. (2006). Numerical evaluation of the ability of the master curve approach to describe the effect of irradiation on the brittle fracture toughness of RPV steels. In Besson, J., Moinereau, D., and Steglich, D., editors, *Local approach to fracture*, pages 297–302. Mines de Paris.
- François, D. and Pineau, A., editors (2002). *From Charpy to present impact testing*. ESIS Publication 30.
- Gao, X., Ruggieri, C., and Dodds, J. (1998). Calibration of weibull stress parameters using fracture toughness data. *Int. J. of Fract.*, 92:175–200.
- Gao, X., Zhang, G., and Sritvatsan, T. (2006). A probabilistic model for prediction of cleavage fracture in the ductile-to-brittle transition region and the effects of temperature on model parameters. *Mater Sci Engng A*, 415:264–272.
- Geney, C. (1998). *Etude expérimentale et modélisation par approche locale de la rupture ductile de trois aciers inoxydables austénitiques et d'un acier 16MND5*. PhD thesis, Université des Sciences et technologies de Lille.
- Gibson, G., Capel, M., and Druce, S. (1991). Effect of heat treatment on the fracture toughness transition properties of an A508 Class 3 steel. In Blauel, J. and Schwalbe, K.-H., editors, *Defect assessment in components—Fundamentals and applications, ESIS/EGF9*, pages 587–611. Mechanical Engineering publications.
- Green, A. and Hundy, B. (1956). Initial plastic yielding in notch bend tests. *J. of the Mech. and Physics of Solids*, 4:128–144.

- Gurovich, B., Kuleshova, E., Nikolaev, Y., and Shtrombakh, Y. (1997). Assessment of relative contributions from different mechanisms to radiation embrittlement of reactor pressure vessel steels. *J. Nuclear Materials*, 246:91–120.
- Gurovich, B., Kuleshova, E., Shtrombakh, Y., Zabusov, O., and Krasikov, E. (2000). Intergranular and intragranular phosphorus segregation in Russian pressure vessel steels due to neutron irradiation. *J. Nuclear Materials*, 279:259–272.
- Gurson, A. (1977). Continuum theory of ductile rupture by void nucleation and growth: Part I— Yield criteria and flow rules for porous ductile media. *J. Eng. Mat. Technol.*, 99:2–15.
- Hausild, P., Berdin, C., and Bompard, P. (2005). Prediction of cleavage fracture for low-ally steel in the ductile-to-brittle transition temperature range. *Mater Sci Engng A*, 391:188–197.
- Hausild, P., Berdin, C., Bompard, P., and Prioul, C. (2003). Influence des inclusions sur la rupture d'un acier faiblement allié. In EDP Sciences, Les Ulis, editor, *Journal de Physique IV*, volume 106, pages 173–182.
- He, R., Steglich, D., Heerens, J., Wang, G., Brocks, W., and Dahms, M. (1998). Influence of particle size and volume fraction on damage and fracture in Al-Al₃Ti composites and micromechanical modelling using the GTM model. *Fatigue Fract Engng Mater Struct*, 21:1189–1201.
- Hill, R. (1950). *The mathematical theory of plasticity*. Clarendon Press, Oxford.
- Hippesley, C. and Druce, G. (1983). The influence of phosphorous segregation to particle/matrix interfaces on ductile fracture in a high strength steel. *Acta metall.*, 31:1861–1872.
- Hohe, J., Friedman, V., Wenck, J., and Siegele, D. (2008). Assessment of the role of micro defect nucleation in probabilistic modeling of cleavage fracture. *Engng Fract Mech*, 75:3306–3327.
- Hohe, J., Stöckl, H., Siegele, D., and Tanguy, B. (2003). Application of the master curve concepts for integrity assessment of power plant components—theoretical and numerical investigations. In 29. *MPA-Seminar – Stuttgart, 9. und 10 Oktober 2003*.
- Hohe, J., Tanguy, B., Friedmann, V., and Siegele, D. (2004). Überprüfung des mastercurve-ansatzes im hinblick auf die anwendung bei deutschen kernkraftwerken. Technical report, Report No S8/2004, Fraunhofer Institut für Werkstoffmechanik, Freiburg.
- Hohe, J., Wenck, J., and Siegele, D. (2006). Assessment of the role of micro defect nucleation in probabilistic modeling of cleavage fracture. In *9th European Mechanics of Materials Conference*, Moret sur Loing, France.
- Hutchinson, J. (1968). Singular behaviour at the end of a tensile crack in a hardening material. *J. Mech. Phys. Solids*, 16:13–31.
- ISO-CD-27306 (2006). *Metallic Materials—Method of Constraint Loss Correction of CTOD Fracture Toughness for Fracture Assessment of Steels Components (Committee draft)*. Japanese Industrial Standards Committee, Technical Regulation, Standards and Conformity, Assessment Policy Unit, METI, Japan.

- Iung, T. (1994). *Propagation rapide et arrêt des fissures dans les aciers pour gazoducs. Rupture par clivage et rupture ductile*. PhD thesis, École des Mines de Paris.
- Iung, T. and Pineau, A. (1996a). Dynamic crack propagation and crack arrest investigated with a new specimen geometry: The ring test. part i: Experimental study on a low-alloy ferritic steel. *Fatigue Fract Engng Mater Struct*, 19:1369–1381.
- Iung, T. and Pineau, A. (1996b). Dynamic crack propagation and crack arrest investigated with a new specimen geometry: The ring test. part i: Numerical calculations. *Fatigue Fract Engng Mater Struct*, 19:1357–1367.
- Kamaya, M. and Itakura, M. (2009). Simulation for intergranular stress corrosion cracking based on a three-dimensional polycrystalline model. *Engng Fract Mech*, 76:386–401.
- Khalili, A. and Kromp, K. (1991). Statistical properties of Weibull estimators. *J. of Materials Science*, 26:6741–6752.
- Kobayashi, T., Takai, K., and Maniwa, H. (1967). Transition behaviour and evaluation of fracture toughness in Charpy impact test. *Transactions ISIJ*, 7:115–125.
- Koers, W., Krom, H., and Bakker, A. (1995). Prediction of cleavage fracture in the brittle to ductile transition region of a ferritic steel. In Kirk, M. and Bakker, A., editors, *Constraint effects in fracture theory and applications : Second volume*, pages 191–208. ASTM STP 1244.
- Koplik, J. and Needleman, A. (1988). Void growth and coalescence in porous plastic solids. *Int. J. Solids Structures*, pages 835–853.
- Kroon, F. and Faleskog, J. (2002). A probabilistic model for cleavage fracture with a length scale–influence of material parameters and constraint. *Int J Frac*, 118:99–118.
- Kroon, F., Faleskog, J., and Öberg, H. (2008). A probabilistic model for cleavage fracture with a length scale–Parameter estimation and prediction of growing crack experiments. *Engng Fract Mech*, 75:2398–2417.
- Kussmaul, K., Eisele, U., and Seidenfuss, M. (1993). On the applicability of local approaches for the determination of the failure behaviour of ductile steels. *Journal of Pressure Vessel Technology*, 115:214–220.
- Lambert–Perlade, A. (2001). *Rupture par clivage de microstructures d’aciers bainitiques obtenues en conditions de soudage*. PhD thesis, Ecole des Mines de Paris.
- Lambert-Perlade, A., Gourgues, A., Besson, J., Sturel, T., and Pineau, A. (2004). Mechanisms and modeling of cleavage fracture in simulated heat-affected zone microstructures of a high-strength low alloy steel. *Met. and Mat. Trans. A*, 35A:1039–1053.
- Landes, J. and Shaffer, D. (1980). *Statistical characterisation of fracture in the transition region*, pages 368–382. ASTM.

- Lautridou, J. and Pineau, A. (1981). Crack initiation and stable crack growth resistance in A508 steels in relation to inclusion distribution. *Engng Fract Mech*, 15(1-2):55–71.
- Le Corre, V. (2006). *Etude de la compétition déchirure ductile/rupture fragile : Application de la tenue mécanique des tubes en acier C–Mn et de leurs joints soudés*. PhD thesis, Ecole Centrale de Lille. Rapport CEA-R-6132.
- Lee, S., Kim, S., Hwang, B., Lee, B., and Lee, C. (2002). Effect of carbide distribution on the fracture toughness in the transition temperature region of an sa 508 steel. *Acta Mater.*, 50:4755–4762.
- Lefevre, W., Barbier, G., Masson, R., and Rousselier, G. (2002). A modified beremin model to simulate the warm pre-stress effect. *Nuc. Eng. Design*, 216:27–42.
- Li, Z., Bilby, B., and Howard, I. (1994). A study of the internal parameters of ductile damage theory. *Fat. Frac. Engng. Mater. Struc.*, 17(9):1075–1087.
- Libert, M. (2007). *Etudes expérimentale et numérique de l'effet des mécanismes de plasticité sur la transition ductile/fragile dans les aciers faiblement alliés*. PhD thesis, Ecole Centrale de Paris.
- Lindley, T. (1965). The effect of a pre-strain on the low temperature mechanical properties of a low carbon steel. *Acta metall.*, 13:681–689.
- Lindley, T., Oates, G., and Richards, C. (1970). A critical appraisal of carbide cracking mechanisms in ferrite/carbide aggregates. *Acta Metall.*, 18:1127–1136.
- Lorentz, E., Besson, J., and Cano, V. (2008). Numerical simulation of ductile fracture with the Rousselier constitutive law . *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg*, 197:1965–1982.
- Luu, T. (2006). *Déchirure ductile des aciers à hautes résistance pour gazoducs (X100)*. PhD thesis, Mines Paris.
- Luu, T., Tanguy, B., Besson, J., Pineau, A., and Perrin, G. (2006a). Local approach based numerical modeling of fracture of high strength modern pipeline steel. In *9th European Mechanics of Materials Conference*, Moret sur Loing, France.
- Luu, T., Tanguy, B., Besson, J., Pineau, A., and Perrin, G. (2006b). Rupture ductile d'un acier haute résistance X100 pour transport de gaz naturel : caractérisation et simulation. In *Matériaux 2006*, Dijon, France.
- Mantyla, M., Rossoll, A., Nedbal, I., Prioul, C., and Marini, B. (1999). Fractographic observations of cleavage fracture initiation in a bainitic A508 steel. *J. Nuclear Materials*, 264:257–262.
- Marandet, B. and Sanz, G. (1976). Etude par la mécanique de la rupture de la ténacité d'aciers à résistance moyenne fournis en forte épaisseur. *Revue de Métallurgie*, pages 359–383.
- Margolin, B. and Kostylev, V. (1999a). Modeling for ductile-to-brittle transition under ductile crack growth for reactor pressure vessel steels. *Int. J. Pressure Vessel Piping*, 76:309–317.

- Margolin, B. and Kostylev, V. (1999b). Radiation embrittlement modelling for reactor pressure vessels steels: II. Ductile fracture toughness prediction. *Int. J. Pres. Ves. and Piping*, 76:731–740.
- Margolin, B., Shvetsova, V., and Karzov, G. (1997). Brittle fracture of nuclear pressure vessel steels—i. local criterion for cleavage fracture. *Int. J. Pres. Ves. and Piping*, 72:73–87.
- Marini, B., Mudry, F., and Pineau, A. (1985). Experimental study of cavity growth in ductile rupture. *Eng. Fract. Mech.*, 22(6):989–996.
- Martín-Meizoso, A., Ocaña-Arizcorreta, I., Gil-Sevillano, J., and Fuentes-Pèrez, M. (1994). Modelling cleavage fracture of bainitic steels. *Acta metall. mater.*, 42(6):2057–2068.
- Mathieu, J. (2006). *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.
- Maxey, W. (1981). Dynamic crack propagation in line pipe. In Sih, G. and Mirabile, M., editors, *Analytical and Experimental Fracture Mechanics*, pages 109–123. Rome.
- Mazière, M. (2007). *Prévision de l'éclatement des disques de Turbomachines*. PhD thesis, Mines Paris, soutenue le 21 Novembre.
- Mc Clintock, F. (1968). A criterion for ductile fracture by the growth of holes. *J. Appl. Mech.*, 35:363–371.
- McClintock, F. A. (1971). *Plasticity aspects of fracture*, pages 47–225. Academic Press.
- McMahon, C. and Cohen, M. (1965). Initiation of cleavage in polycrystalline iron. *Acta metall.*, 13:591–604.
- Miller, M. and Burke, M. (1992). An atom probe field ion microscopy study of neutron-irradiated pressure vessel steels. *J. Nuclear Materials*, 195:68–82.
- Moinereau, D., Dahl, A., Chapuliot, S., Yuritzinn, T., Gilles, P., and Tanguy, B. (2007). The demonstration of warm pre-stress effect in RPV assessment : some experimental results and their interpretation by fracture mechanics. In *7th International ASTM/ESIS Symposium on Fatigue and Fracture Mechanics*, Tampa, USA.
- Mudry, F. (1987). A local approach to cleavage fracture. *Nuc. Eng. Design*, 105:65–76.
- Nanga, S. (2008). *Comportement et transformations martensitiques de deux aciers inoxydables austénitiques : effets de la température, de la vitesse et du chargement*. PhD thesis, Mines Paris, soutenue le 26 Novembre.
- Nikolaev, Y. A., Nikolaeva, A. V., and Shtrombakh, Y. I. (2002). Radiation embrittlement of low-alloy steels. *International Journal of Pressure Vessels and Piping*, 79:619–636.
- Norris, D. (1979). Computer simulation of the Charpy V-notch toughness test. *Eng. Fract. Mech.*, 11:261–274.

- Oates, G. (1968). Effect of hydrostatic stress on cleavage fracture in a mild steel and a low carbon manganese steel. *Journal of the Iron and Steel Institute*, pages 930–935.
- O'Donoghue, P., Kanninen, M., Leung, C., Demofont i, G., and Venzi, S. (1997). The development and validation of a dynamic fracture propagation model for gas transmission pipelines. *Int. J. Pres. Ves. and Piping*, 70:11–25.
- Ortiz, M. and Molinari, A. (1992). Effect of strain hardening and rate sensitivity of the dynamic growth of a void in a plastic material. *Journal of Applied Mechanics*, 59:48–53.
- Osipov, N. (2007). *Generation and numerical study of bainitic microstructures. Intergranular local approach to fracture*. PhD thesis, Mines Paris.
- Osterstock, S., Tanguy, B., Bordet, S., and N'Guyen, F. (2004). Relation "microstructure-cleavage mechanisms" in 18MND6 RPV steel: Characterization of carbides and inclusions. Projet d'option DEA MSE INSTN.
- Pardoen, T. and Hutchinson, J. (2000). An extended model for void growth and coalescence. *J. Mech. Phys. Solids*, 48(12):2467–2512.
- Pardoen, T. and Hutchinson, J. (2003). Micromechanics-based model for trends in toughness of ductile metals. *Acta mater.*, 51:133–148.
- Parrot, A., Dahl, A., Forget, P., and Marini, B. (2006). Evaluation of fracture toughness from instrumented Charpy impact tests for a reactor pressure vessel steel using local approach to fracture. In Besson, J., Moinereau, D., and Steglich, D., editors, *Local approach to fracture*, pages 291–296. Mines de Paris.
- Perrin, G. and Leblond, J.-B. (1990). Analytical study of a hollow sphere made of plastic porous material and subjected to hydrostatic tension— application to some problems in ductile fracture of metals. *Int. J. Plasticity*, 6(6):677–699.
- Petti, J. and Dodds Jr., R. (2005). Calibration of the weibull stress scale parameter, σ_u , using the master curve method. *Engng Fract Mech*, 72:91–120.
- Pineau, A. (1981). Review of fracture micromechanisms and a local approach to predicting crack resistance in low strength steels. In *ICF 5*, volume 2, pages 553–575.
- Pineau, A. and Pardoen, T. (2007). Failure of Metals. In Ainsworth, R. and Schwalbe, K.-H., editors, *Comprehensive Structural Integrity*, volume 2, pages 684–797. Elsevier Pergamon.
- Pluinage, G. and al. (1999). Effect of ferritic microstructure on local damage zone distance associated with fracture near notch. *Theoretical and applied fracture mechanics*, 31:149–156.
- R6-procedure (2000). *Assessment of the integrity of structures containing defects. Appendix 16–17. Revision 4*. British Energy.
- Renevey, S. (1997). *Approches globale et locale de la rupture dans le domaine de la transition fragile–ductile d'un acier faiblement allié*. PhD thesis, Université Paris XI Orsay.

- Rice, J. and Rosengren, G. (1968). Plane strain deformation near a crack tip in a power-law hardening material. *J. Mech. Phys. Solids*, 16:1–12.
- Rice, J. and Tracey, D. (1969). On the enlargement of voids in triaxial stress fields. *J. Mech. Phys. Sol.*, 17:201–217.
- Ritchie, O., Knott, J., and Rice, J. (1973). On the relationship between critical tensile stress and fracture toughness in mild steel. *J. Mech. Phys. Solids*, pages 395–410.
- Ritchie, R. O., Server, W., and Wullaert, R. (1979). Critical fracture stress and fracture strain models for the prediction of lower and upper shelf toughness in nuclear pressure vessel steels. *Met. Trans. A*, 10A:1557–1570.
- Rivalin, F., Besson, J., Di Fant, M., and Pineau, A. (2000). Ductile tearing of pipeline-steel wide plates — II.: Modeling of in-plane crack propagation. *Engng Fract Mech*, 68(3):347–364.
- Rivalin, F., Besson, J., Di Fant, M., and Pineau, A. (2001a). Ductile tearing of pipeline-steel wide plates. Part II: Modeling of in-plane crack propagation. *Engng Fract Mech*, 68:347–364.
- Rivalin, F., Pineau, A., DiFant, M., and Besson, J. (2001b). Ductile tearing of pipeline-steel wide plates. Part I: Dynamic and quasi-static experiments. *Engng Fract Mech*, 68:329–345.
- Roberston, C., Obrtlík, K., and Marini, B. (2007). Dislocation structures in 16MND5 pressure vessels steel strained in uniaxial tension at different temperatures from -196°C up to 25°C . *J. Nuclear Materials*, 366:58–69.
- Rosenfield, A. and Majumdar, B. (1987). Micromechanisms and toughness for cleavage fracture of steel. *Nuc. Eng. Design*, 105:51–57.
- Rosenfield, A., Shetty, D., and Skidmore, A. (1983). Fractographic observations of cleavage initiation in the ductile–brittle transition region of a reactor–pressure–vessel steel. *Met. Trans. A*, 14:1934–1937.
- Rossoll, A. (1998). *Détermination de la ténacité d'un acier faiblement allié à partir de l'essai Charpy instrumenté*. PhD thesis, Ecole Centrale Paris.
- Rossoll, A., Berdin, C., Forget, P., Prioul, C., and Marini, B. (1999). Mechanical aspects of the Charpy impact test. *Nuc. Eng. Design*, 188:217–229.
- Rossoll, A., Berdin, C., and Prioul, C. (2002). Determination of the fracture toughness of a low alloy steel by the instrumented Charpy impact test. *Int J Frac*, 115:205–226.
- Rousselier, G. (1986). Les modèles de rupture ductile et leurs possibilités actuelles dans le cadre de l'approche locale de la rupture. In *Séminaire international sur l'approche locale de la rupture*, pages 257–284, Moret–sur–Loing.
- Rousselier, G. (1987). Ductile fracture models and their potential in local approach of fracture. *Nuc. Eng. Design*, 105:97–111.

- Rousselier, G. (2001). Dissipation in porous metal plasticity and ductile fracture. *J. Mech. Phys. Solids*, 49:1727–1746.
- Russell, S. (1898). Experiments with a new machine for testing materials by impact. *Transactions of American Society of Civil Engineers*, 39(826):237–250.
- Sainte Catherine, C., Hourdequin, N., Galon, P., and Forget, P. (2000). Finite element simulations of Charpy–V and sub–size tests for a low alloy RPV ferritic steel. In *ECF 13, Fracture Mechanics : Applications and Challenges*, San Sebastian, Spain. Elsevier Science.
- Sainte-Catherine, C., Poussard, C., Vodinh, J., Schill, R., Hourdequin, N., Galon, P., and Forget, P. (2001). Finite element simulations and empirical correlation for Charpy–V and sub–size Charpy tests on an un–irradiated low alloy RPV ferritic steel. In *Fourth Symposium on small specimen test techniques*, Reno, Nevada, USA. ASTM STP 1418.
- Samal, M., Seidenfuss, M., Ross, E., Dutta, B., and Kushwaha, H. (2008). Experimental and numerical investigation of ductile–to–brittle transition in a pressure vessel steel. *Mater Sci Engng A*, 496:25–35.
- Schmitt, W., Böhme, W., and Sun, D. (1994a). New developments in fracture toughness evaluation. In *ECF10, Structural Integrity*, pages 159–170.
- Schmitt, W., Sun, D., Böhme, W., and Nagel, G. (1994b). Evaluation of fracture toughness based on results of instrumented Charpy tests. *Int. J. Pres. Ves. and Piping*, 59:21–29.
- Siegele, D., Friedman, V., and Hohe, J. (2006). Investigations on damage evolution and cleavage based on combined experimental and numerical methods. In Besson, J., Moinereau, D., and Steglich, D., editors, *Local approach to fracture*. Mines de Paris.
- Siruguet, K. and Leblond, J. (2004a). Effect of void locking by inclusions upon the plastic behavior of porous ductile solids–i: theoretical modelling and numerical study of void coalescence. *Int. J. of Plasticity*, 20:255–268.
- Siruguet, K. and Leblond, J. (2004b). Effect of void locking by inclusions upon the plastic behavior of porous ductile solids–i: theoretical modelling and numerical study of void growth. *Int. J. of Plasticity*, 20:225–254.
- Smith, E. (1966). The nucleation and growth of cleavage microcracks in mild steel. In Institute of Physics and Physical Society, editor, *Physical basis of yield and fracture : conference proceedings*, pages 36–46, Oxford, Septembre.
- Stöckl, H., Bösch, R., Schmitt, W., Varfolomeyev, I., and Chen, J. (2000). Quantification of the warm prestressing effect in a shape welded 10mnmoni5-5 material. *Engng Fract Mech*, 67:119–137.
- Tahar, M. (1998). *Applications de l'approche locale de la rupture fragile à l'acier 16MND5 : Corrélation résilience–ténacité, Probabilité de rupture bimodale (clivage et intergranulaire)*. PhD thesis, École des Mines de Paris.

- Tahar, M., Tanguy, B., Grandjean, Y., and Piques, R. (1998). CVN energy and fracture toughness of an A508 steel at low temperature. In publishing, E., editor, *Fracture from defects ECF12*, Sheffield, 14–18 Septembre.
- Tanguy, B. (2001). *Modélisation de l'essai Charpy par l'approche locale de la rupture. Application au cas de l'acier 16MND5 dans le domaine de la transition*. PhD thesis, Ecole des Mines de Paris. <http://pastel.paristech.org/documents/disk0/00/00/02/28/index.html>.
- Tanguy, B. (2007). Etude par l'approche locale de la rupture du décalage des courbes de résilience et de ténacité du à la fragilisation par irradiation. Technical report, Rapport final, Janvier, Centre des Matériaux, ENSMP.
- Tanguy, B. and Besson, J. (2002). An extension of the Rousselier model to viscoplastic temperature dependant materials. *Int J Frac*, 116:81–101.
- Tanguy, B. and Besson, J. (2005). Simulation of the ductile to brittle Charpy transition curve after irradiation: effect of the hardening behavior. In 9th *International Conference On Structural Safety And Reliability*, Rome, Italy.
- Tanguy, B., Besson, J., and Bugat, S. (2006a). Modelling of irradiation embrittlement in the ductile to brittle transition range for an A508 pressure vessel steel. In *PVP ASME 2006-ICPVT-11*, Vancouver, Canada.
- Tanguy, B., Besson, J., and Pineau, A. (2003a). Comment on effect of carbide distribution on the fracture toughness in the transition region of an sa 508 steel. *Scripta Mater.*, 49:191–197.
- Tanguy, B., Besson, J., Piques, R., and Pineau, A. (2001). Numerical modeling of Charpy V-notch tests. In *Charpy Centenary Conference CCC2001*, Poitiers, France.
- Tanguy, B., Besson, J., Piques, R., and Pineau, A. (2002). Numerical Modeling of Charpy V-notch tests. In François, D. and Pineau, A., editors, *From Charpy to present impact testing*, pages 461–468.ESIS Publication 30.
- Tanguy, B., Besson, J., Piques, R., and Pineau, A. (2005a). Ductile to brittle transition of a A508 steel characterized by the Charpy impact test. Part—II: modeling of the Charpy transition curve. *Engng Fract Mech*, 72/3:413–434.
- Tanguy, B., Besson, J., Piques, R., and Pineau, A. (2005b). Ductile to brittle transition of an A508 steel characterized by the Charpy impact test. Part—I: experimental results. *Engng Fract Mech*, 72/1:49–72.
- Tanguy, B., Bouchet, C., Besson, J., and Bugat, S. (2006b). Local approach to fracture based prediction of the ΔT_{56J} and $\Delta T_{K_{Ic,100}}$ shifts due to irradiation for an A508 pressure vessel steel. *Engng Fract Mech*, 73:191–206.
- Tanguy, B., Bouchet, C., Bordet, S., Besson, J., and Pineau, A. (2006c). Toward a better understanding of the cleavage in RPV steels: Local mechanical conditions and evaluation of a nucleation enriched

Weibull model and of the Beremin model over a large temperature range. In *9th European Mechanics of Materials Conference*, Moret sur Loing, France.

Tanguy, B., Luu, T., Perrin, G., Pineau, A., and Besson, J. (2008). Plastic and damage behavior of a high strength X100 pipeline steel: experiments and modelling. *Int. J. Pressure Vessel Piping*, 85:322–335.

Tanguy, B., Piques, R., Laiarinandrasana, L., and Pineau, A. (2000a). Mechanical behaviour of A508 steel based on double nonlinear viscoplastic constitutive equation. In Miannay, D., Costa, P., François, D., and Pineau, A., editors, *EUROMAT 2000, Advances in Mechanical Behaviour: Plasticity and Damage*, pages 499–504. Elsevier.

Tanguy, B., Piques, R., Laiarinandrasana, L., and Pineau, A. (2000b). Notch stress strain distribution in Charpy V specimen / experiments and modelling. In Fuentes, M., Elices, M., Martín-Meizoso, A., and Martínez-Esnaola, J., editors, *ECF 13, Fracture Mechanics : Applications and Challenges*, San Sebastian, Spain. Elsevier Science.

Tanguy, B. and Siegele, D. (2002). Investigation of the Mastercurve concept relating to applicability for German nuclear power plants for a 22NiMoCr 3-7 material. Technical report, Fraunhofer IWM institute, Freiburg.

Tanguy, B., Stöckl, H., and Siegele, D. (2003b). Applicability of Master curve concept for the safety assessment of power plant components-Experimental investigations. In *29. MPA-Seminar – Stuttgart, 9. und 10 October 2003*.

Thomason, P. F. (1985). Three-dimensional models for the plastic limit-loads at incipient failure of the intervoid matrix in ductile porous solids. *Acta Met.*, 33(6):1079–1085.

Tong, W. and Ravichandran, G. (1995). Inertial effects on void growth in porous viscoplastic materials. *Journal of Applied Mechanics*, 62:633–639.

Trethewey, K., Wenman, M., Chard-Tuckey, P., and Roebuck, B. (2008). Correlation of meso- and micro-scale hardness measurements with the pitting of plastically-deformed type 304L stainless steel. *Cor. Sci.*, 50:1132–1141.

Tvergaard, V. (1981). Influence of voids on shear band instabilities under plane strain condition. *Int J Frac*, 17(4):389–407.

Tvergaard, V. (1982). Influence of void nucleation on ductile shear fracture at a free surface. *J. Mech. Phys. Solids*, 30:399–425.

Tvergaard, V. (1990). Material failure by void growth to coalescence. *Advances in Applied Mechanics*, 27:83–151.

Tvergaard, V. and Needleman, A. (1988). An analysis of the temperature and rate dependence of Charpy V-Notch energies for a high nitrogen steel. *Int J Frac*, 37:197–215.

- Válka, L., Holzmann, M., and Dlouhý (1997). The role of microstructure in brittle fracture behaviour of low alloy tempered bainitic steel. *Materials Science and Engineering*, A234–236:723–726.
- Wallin, K. (1989). A simple theoretical Charpy-V— K_{Ic} correlation for irradiation embrittlement. In Marriott and al., editors, *Innovative approaches to irradiation damage and fracture analysis*, volume 170, pages 93–100. The American society of mechanical engineers.
- Wallin, K. and Laukkanen, A. (2008). New developments of the Wallin, Saario, Törrönen cleavage fracture model. *Engng Fract Mech*, 75:3367–3377.
- Wallin, K. and Saario, T. and Törrönen, K. (1984). Statistical model for carbide induced brittle fracture in steel. *Metal Science*, 18:13–16.
- Wallin, K. and Saario, T. and Törrönen, K. (1987). Fracture of brittle particles in a ductile matrix. *Int J Frac*, 32:201–209.
- Wang, G. and Chen, J. H. (2001). On locations initiating cleavage fracture in precracked specimens of low alloy steel and weld metal. *Int J Frac*, 108:235–250.
- Wang, Z. and Jiang, Q. (1997). A yield criterion for porous ductile media at high strain rate. *Journal of Applied Mechanics*, 64:503–509.
- Wasiluk, B., Petti, J., and Dodds, R. (2006). Temperature dependence of Weibull stress parameters: Studies using the Euro-material. *Engng Fract Mech*, 73:1046–1069.
- Weibull, W. (1939). A statistical theory of the strength of materials. *Ing. Vetenskap. Akad. Handl.*, 12:153.
- Weibull, W. (1951). A statistical distribution function of wide applicability. *J. Applied Mechanics*, pages 293–297.
- Wilshaw, T., Rau, C., and Tetelman, A. (1968). A general model to predict the elastic–plastic stress distribution and fracture strength of notched bars in plane strain bending. *Eng. Frac. Mech.*, 1:191–211.
- Xia, L. and Shih, C. (1996). Ductile crack growth–III. Transition to cleavage fracture incorporating statistics. *J. Mech. Phys. Solids*, 44:603–639.
- Zhang, X., Armstrong, R., and Irwin, G. (1986). Cleavage fracturing stages at micrometre–size inclusions in pressure vessel steel weld metal. *J. of Mat. Sci. letters*, 5:961–964.
- Zhang, Z. (1996). A sensitivity analysis of material parameters for the Gurson constitutive model. *Fatigue Fract. Engng Mater. Struct.*, 19(5):561–570.
- Zhang, Z. and Hauge, H. (1999). On the Gurson micro–mechanical parameters. In Panotin, T. and Sheppard, S., editors, *Fatigue and Fracture Mechanics : Twenty–Ninth volume*, pages 364–383. ASTM STP 1332.
- Zhang, Z. and Niemi, E. (1995). A new failure criterion for the Gurson–Tvergaard dilational constitutive model. *Int J Frac*, 70:321–334.

Zhang, Z., Thaulow, and Odegard, O. (2000). A complete Gurson model approach for ductile fracture. *Engng Fract Mech*, 67:155–168.