



Sujet de thèse: Développement et implémentation numérique d'un modèle d'homogénéisation élasto-viscoplastique pour des aciers inoxydables austéno-ferritiques vieillis

Date de démarrage et durée: dès que possible, Durée: 3 ans.

Contacts:

Dr. Adrien Guéry, EDF Research and Development, Centre des Renardières, Moret-sur-Loing, France.

Email address: adrien.guery@edf.fr

Dr. Stephane Berbenni, LEM3, Université de Lorraine, CNRS, Metz, France. Email address:

stephane.berbenni@univ-lorraine.fr

Lieu: La thèse sera principalement menée au LEM3, CNRS UMR 7239, Metz, France.

Contexte et objectifs:

Les aciers duplex austéno-ferritiques sont largement utilisés dans le circuit primaire des centrales nucléaires de type réacteur à eau pressurisée. Il est bien établi qu'à la température de service (environ 320°C) et après de longues périodes d'exposition (plus de 10 000 heures), la phase ferritique de ces aciers duplex peut être fragilisée par un phénomène appelé "fragilisation à 475°C" (cf. Bugat et al. [1,2]). Ainsi, la ferrite subit un changement de mode de rupture d'une rupture ductile à un mode de fissuration par clivage.

L'objectif de cette thèse est de développer en lien avec EDF R&D un modèle micromécanique multi-échelle robuste basé sur un modèle d'homogénéisation à champs moyens en élasto-viscoplasticité cristalline qui sera complété par des calculs numériques champs complets (FFT/FEM) effectués au LEM3 et à EDF R&D. Les schémas d'homogénéisation considéreront à la fois l'échelle bi-cristalline et l'échelle poly-cristalline et devra être capable de prédire le comportement mécanique complexe de ces aciers inoxydable duplex (austénite/ferrite). Le modèle d'homogénéisation à champs moyens développé pourra alors alimenter des calculs de structures EF et des modèles d'endommagement adaptés pour ces aciers chez EDF R&D. Le clivage dans la ferrite est contrôlé par les contraintes normales (au plan de clivage), qui nécessitent d'être bien estimées par des modèles récents d'homogénéisation en élasto-viscoplasticité cristalline. Un modèle à « champs translatés » d'extension affine établi en grandes déformations sera développé au LEM3 et utilisé pour cette thèse avec des lois cristallines où un bon compromis physique/numérique sera recherché. De plus, à l'issue de cette thèse, une collaboration avec un autre partenaire académique (S. Forest, J. Besson, Centre des Matériaux, Mines) pourra être envisagée en ce qui concerne l'utilisation des résultats de la thèse pour améliorer les modèles d'initiation de l'endommagement et de clivage. Dans la présente thèse, la stratégie du modèle d'homogénéisation sera de considérer le glissement cristallographique dans les deux phases et un modèle d'homogénéisation bi-cristalline permettant de prendre en compte l'arrangement et l'imbrication des lattes monocristallines de ferrite et d'austénite (percolation). La valeur ajoutée pour EDF R&D est d'améliorer la description mécanique de la structure biphasée en lattes et les interactions mécaniques entre phases dans un modèle d'homogénéisation physiquement raffiné et numériquement efficace pour son implémentation dans le code EF développé par EDF R&D (code aster). Le principal résultat attendu du projet de thèse sera de permettre d'identifier précisément le comportement

homogénéisé de microstructures bi-cristallines austéno-ferritiques en lattes pour ces aciers duplex vieillis.

Description du travail et résultats attendus:

Un modèle d'homogénéisation à l'échelle du bi-cristal (ferrite + austénite) sera développé et adapté à la structure bi-percolée. Comme point de départ, un modèle auto-cohérent basé sur l'approche à « champs translatsés » (TF) avec formulation affine sera pris en main [3,4]. Le modèle prendra en compte le comportement élasto-viscoplastique du monocristal en grandes transformations [5,6] des phases ferritique (CC) et austénitique (CFC) basés sur les lois d'écrouissage intra-cristallines et les lois d'écoulement du glissement adaptées pour cet acier. Le cas de la ferrite (phase CC) sera spécifiquement étudié de même que les relations d'orientations cristallographiques entre les deux phases. Les contraintes et déformations locales et particulièrement les contraintes normales (au plan de clivage qui sont utiles pour comprendre l'endommagement du matériau) seront calculées pour la structure bi-cristalline. À la suite de Bugat et al. [1,2], l'effet des morphologies de variantes de ferrite par rapport à l'austénite sera considéré au travers de tenseurs d'Eshelby qui pourront approximer (sans faire automatiquement des calculs de cellules) les formes de lattes par des hétérogénéités ellipsoïdales. Le modèle d'homogénéisation sera validé par des campagnes de calculs champs complets type FFT (comme récemment développé dans [7]) / EF en lien avec EDF sur cellules élémentaires afin de valider le modèle homogénéisé pour différents chargements mécaniques prenant en considération la microstructure réelle et la bi-percolation. Des mesures EBSD combinées au FIB à EDF/MAI pourront aussi donner une description 3D cristallographique/morphologique de l'arrangement et de l'imbrication des phases. Cet élément important sera considéré pour raffiner le modèle d'homogénéisation à champs moyens pour le bi-cristal.

Les résultats attendus et différents livrables du projet de thèse sont les suivants:

- Développement d'un modèle d'homogénéisation « champs moyens » pour le bi-cristal (ferrite + austénite) d'aciers inoxydables duplex austéno-ferritiques incluant le glissement cristallographique, les orientations cristallines des phases, un formalisme « grandes déformations » et les morphologies en lattes des phases,
- Des calculs de cellules par technique « champs complets » FFT (« Fast Fourier Transform » en anglais) en élasto-viscoplasticité cristalline sur des microstructures bi-cristallines (ferrite + austénite) réalistes avec prises en compte des morphologies, de l'arrangement des phases (percolation) et des relations d'orientations cristallographiques entre les phases,
- Développement des équations constitutives du nouveau modèle d'homogénéisation pour aciers duplex austéno-ferritiques vieillis en utilisant les modèles de plasticité cristalline d'EDF R&D et transfert via MFront aux calculs par EF à EDF R&D.

Profil du candidat recherché:

Pour ce travail de thèse, un profil niveau « master 2 » de haut niveau, combinant des connaissances en science des matériaux, mécanique des milieux continus, techniques d'homogénéisation en mécanique des matériaux, mécanique numérique (EF,FFT) et plasticité cristalline est idéalement recherché.



PhD thesis: Development and numerical implementation of a micromechanical homogenization elasto-viscoplastic model for aged duplex ferritic-austenitic stainless steels

Starting date and duration: as soon as possible, Duration: 3 years

Contacts

Dr. Adrien Guéry, EDF Research and Development, Centre des Renardières, Moret-sur-Loing, France.
Email address: adrien.guery@edf.fr

Dr. Stephane Berbenni, LEM3, Université de Lorraine, CNRS, Metz, France. Email address:
stephane.berbenni@univ-lorraine.fr

Place: The PhD work will be mainly performed in LEM3, CNRS UMR 7239, Metz, France.

Context and objectives

Duplex ferritic-austenitic stainless steels are widely used in the primary loop of the cooling system of nuclear pressurised water reactors. It is well established that at the service temperature (about 320°C) and after long periods of exposure (more than 10 000 hours), the ferritic phase of these duplex steels may be embrittled by a phenomenon known as "475°C" embrittlement (see Bugat et al. [1,2]). Then the damage mode in ferrite changes from ductile failure to cleavage cracking.

The issue addressed by the present PhD proposal is to develop a robust multiscale micromechanical approach based on both mean field homogenization scheme and full field calculations (FFT/ FEM) performed in LEM3 and EDF Research and Development. The homogenization schemes will consider both the bicrystal scale and the polycrystal scale and must be able to predict the complex mechanical behavior of aged duplex (austenite/ferrite) stainless steels. It should also feed FE structural calculations and damage models for EDF Research and Development. Cleavage in ferrite is primarily controlled by tensile (normal) stresses, which need to be well estimated by recent developed crystal plasticity homogenization schemes (finite strain translated field-based self-consistent model currently developed in LEM3). In addition, this PhD thesis will bring further scientific collaboration with another academic partner (S. Forest, J. Besson, Materials Centre, School of Mines) regarding damage initiation models and cleavage. The homogenization strategy will consider crystallographic slip at the scale of both crystalline phases and a homogenized bi-crystal model containing the imbrication (percolation) of ferritic and austenitic laths. The added value for EDF is to improve the mechanical description of two-phase lath structure and the mechanical interactions between phases in a more refined and physical homogenization scheme that can be further implemented in the FE code (aster) developed by EDF Research and Development. The main outcome of the project should permit to accurately identify the homogenized behavior for bi-crystal microstructure configurations in such duplex steels.

Work description and deliverables

A homogenization model at the (ferrite + austenite) bi-crystal level will be developed and adapted. It will be based on recently developed translated fields (TF) method with affine formulation [3,4]. The model will take into account the single crystal elasto(visco)-plastic behavior at large strains [5,6] of both ferrite (BCC) and austenite (FCC) based on slip/strain-hardening rules developed by EDF Research and Development for this material. The case of ferrite (BCC phase) will be specifically studied as well as the orientation relationships between both phases. Local stress and strain fields especially normal stresses

(useful for further damage initiation studies) will be calculated at the level of the bi-crystalline structure. As in Bugat et al. [1,2], the morphology of the different phases and ferrite variants with respect to austenite will be considered through relevant Eshelby-type tensors to approximate the lath morphologies with ellipsoidal heterogeneities. This homogenization model will be validated for different mechanical loadings by unit cell full field crystal plasticity FFT (as recently developed e.g. in [7]) / FE based simulations with EDF taking into bi-percolated structure. EBSD experiments combined with FIB at EDF/MAI will give a 3D description of the crystallographic/morphology of the two-phase microstructure, especially regarding the percolation of both phases. This essential feature will be taken into account in the homogenization model.

The deliverables of the PhD project are the following:

- Development of a homogenization model for two-phase grains (bi-crystal microstructure for duplex steels) including crystallographic slip, phase orientations, large deformation setting and lath morphologies.
- Fast Fourier Transform (FFT)-based unit cell calculations on bi-crystal microstructures (ferrite + austenite) taking into account crystal plasticity, local orientation relationships between phases and percolated structure.
- Development of new homogenized constitutive equations for duplex steels using EDF crystal plasticity models in finite strain framework and transfer via MFront to FE calculations in EDF Research and Development.

Candidate profile:

For this PhD work, ideally a strong profile is searched combining materials science, continuum mechanics, homogenization techniques, computational mechanics (FEM, FFT) and crystal plasticity.

References

- [1] S. Bugat, J. Besson, A.-F. Gourgues, F. N'Guyen, A. Pineau. Microstructure and damage initiation in duplex stainless steels. *Mater. Sci. Eng. A317*,32–36, 2001.
- [2] S. Bugat, J. Besson, A. Pineau. Micromechanical modeling of the behavior of duplex stainless steels. *Comp. Mater. Sci.* 16, 158-166, 1999.
- [3] C. Mareau, S. Berbenni, An Affine formulation for the Self-Consistent modeling of Elasto-Viscoplastic heterogeneous materials based on the Translated Field method, *Int. J. Plast.* 64, 134-150, 2015.
- [4] S. Lhadi, S. Berbenni, N. Gey, T. Richeton, L. Germain, Micromechanical modeling of the effect of elastic and plastic anisotropies on the mechanical behavior of β -Ti alloy, *Int J. Plast.* 109, 88–107, 2018.
- [5] J.P. Lorrain. Ductility criterion based on ellipticity loss of the elastic-plastic tangent modulus deduced from a self-consistent model. PhD Thesis, Arts et Métiers Paris Tech, Metz 2005.
- [6] S. Forest, P. Pilvin, Modelling Finite deformation of polycrystals using Local Objective Frames. *ZAMM* 79, 199-202, 1999.
- [7] K.S. Djaka, S. Berbenni, V. Taupin, R. A. Lebensohn. FFT-based numerical implementation of Mesoscale Field Dislocation Mechanics: application to two-phase laminates. 2018, submitted.