

Un *pipeline* numérique pour la simulation probabiliste des essais de résilience des aciers de forge en présence de ségrégations chimiques millimétriques.

P. Kerfriden¹, R. Kenko¹, J. Besson¹, K. Ammar¹, L. Sun², M. Cadet³, F. Tioguem³, P. Joly²

¹ Centre des Matériaux, Mines Paris - PSL, pierre.kerfriden@minesparis.psl.eu

² Framatome, Direction Technique et Ingénierie, Courbevoie

³ Framatome, Le Creusot

Résumé — Cette étude propose un *pipeline* numérique pour simuler la variabilité des essais Charpy dans les aciers de forge, en modélisant explicitement le matériau comme un milieu hétérogène affecté par des ségrégations chimiques mésoscopiques. Des champs 3D de ségrégation générés par SliceGAN sont injectés dans une modélisation élasto-plastique haute fidélité. La transition ductile–fragile est décrite par un modèle de Beremin identifié expérimentalement. Les simulations reproduisent la variabilité observée et quantifient la contribution des ségrégations. Les perspectives incluent l’hétérogénéisation des paramètres du modèle de rupture fragile.

Mots clés — Essais de résilience, éléments finis nonlinéaires, champs aléatoires, mécanique de la rupture, GAN.

Introduction

Les ségrégations chimiques présentes dans les aciers forgés destinés à la fabrication des cuves de centrales nucléaires font l’objet d’études depuis de nombreuses années. Lors du refroidissement d’un lingot de grande dimension, les éléments d’alliage migrent au sein du matériau et peuvent localement se concentrer, entraînant une hétérogénéité de composition chimique et une fragilisation potentielle de la matière.

Ces ségrégations apparaissent à différentes échelles. Dans le cadre de cette étude, l’attention est portée sur les ségrégations mésoscopiques, dont l’ordre de grandeur est typiquement millimétrique. Une illustration représentative de ces ségrégations, obtenue par une attaque métallographique au Nital, est présentée en Figure 1.

Ces ségrégations sont reconnues comme l’une des principales sources de dispersion des propriétés mécaniques, en particulier de la dureté et de la résistance à la rupture. L’objectif de cette étude est de modéliser numériquement les ségrégations mésoscopiques et de montrer qu’il est possible de décomposer la variabilité observée de la résistance à la rupture en deux contributions :

- une part directement imputable aux ségrégations chimiques,
- une part de variabilité « irréductible », associée aux plus petites échelles microstructurales.

L’étude se concentre sur les essais de résilience Charpy. L’approche proposée est de nature hybride. Elle comporte d’une part une modélisation haute fidélité du comportement mécanique d’un matériau ségrégré; cette modélisation sert de base à la simulation, par éléments finis, de la fissuration ductile au cours des essais de résilience. D’autre part, l’approche intègre un volet statistique à double niveau. Premièrement, la transition ductile–fragile est décrite au moyen du modèle classique de Bérémmin, fondé sur une statistique de type maillon faible, aujourd’hui largement utilisée dans l’industrie. Deuxièmement, les ségrégations chimiques sont représentées par un champ aléatoire au sein de l’éprouvette Charpy, généré typiquement soit à l’aide d’un processus gaussien, soit via des réseaux adversariaux génératifs (GAN).

Cet article présente l’ensemble du pipeline numérique développé pour mener à bien cette étude, ainsi qu’une sélection des résultats obtenus.

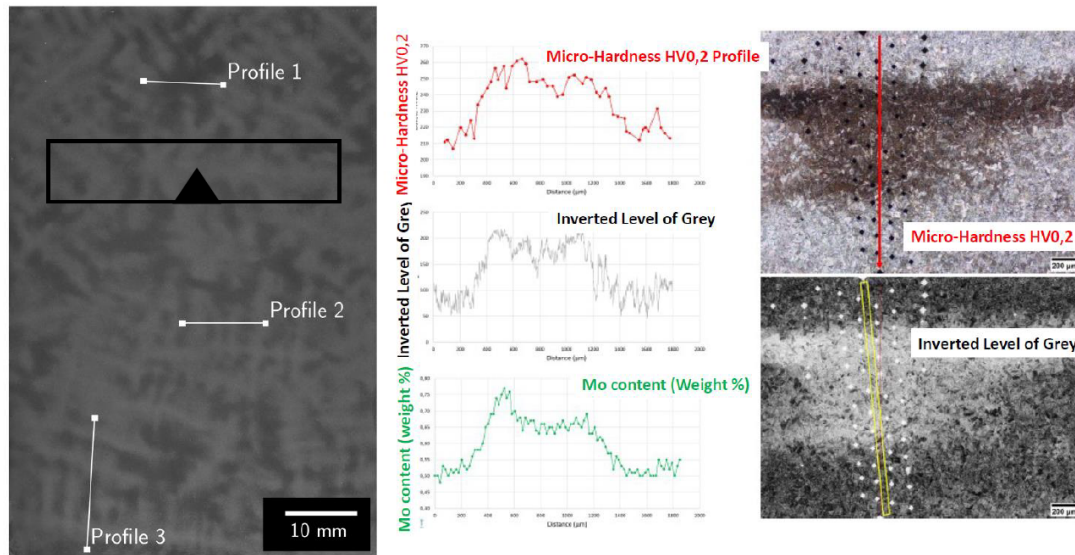


FIGURE 1 – Macrographie de ségrégations chimiques dans un acier de forge (à gauche). À droite, résultats d’essais de microdureté.

1 Génération du champ tridimensionnel de ségrégations chimiques

Une difficulté majeure de l’étude réside dans le fait que les macrographies des champs de ségrégation sont des données 2D, alors que la démarche de simulation nécessite des champs 3D du matériau. Pour répondre à cette problématique, nous avons développé une approche fondée sur l’intelligence générative permettant de reconstruire des champs tridimensionnels à partir d’images bidimensionnelles. Cette approche s’appuie sur l’architecture de réseaux de neurones convolutifs SliceGAN, entraînée — comme son nom l’indique — selon un schéma adversarial.

Le principe général est illustré sur la figure 2. À partir d’une image multicanale de bruit gaussien, un générateur (de type décodeur convolutif) construit un volume 3D en appliquant une succession d’opérations de convolutions transposées. Ce générateur est entraîné conjointement avec un discriminateur, qui compare les coupes du volume généré — selon les normales x, y et z — à des images de référence obtenues par échantillonnage d’une macrographie de grande taille. L’ensemble du processus d’apprentissage suit la logique classique des réseaux adversariaux génératifs, dans laquelle le générateur et le discriminateur s’améliorent mutuellement au fil des itérations.

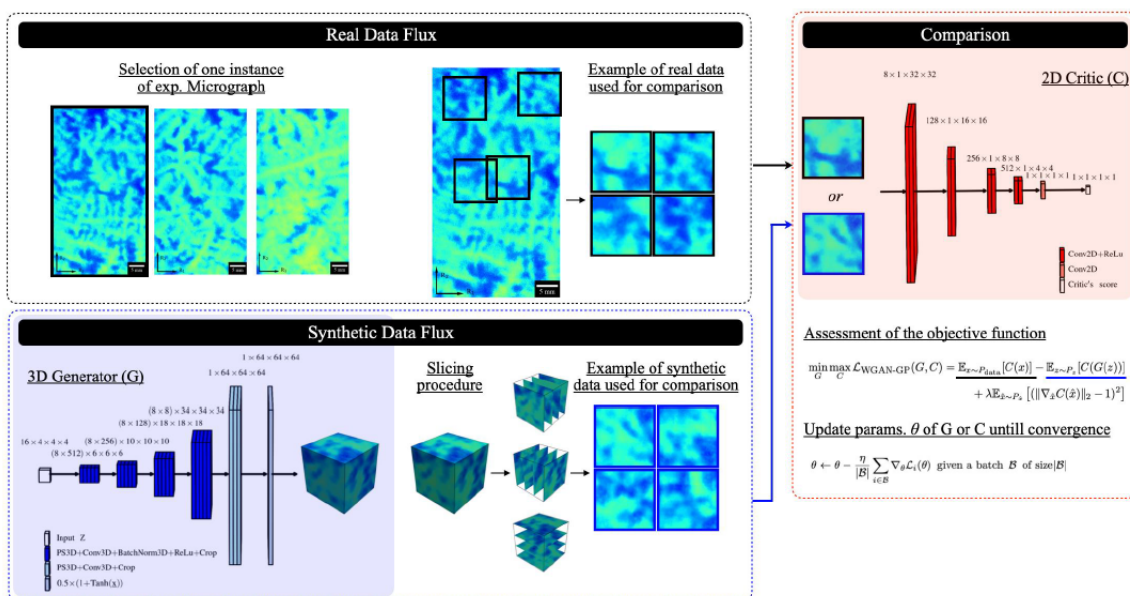


FIGURE 2 – SliceGAN pour générer des images 3D de mésoségrégations à partir d’images 2D.

2 Comportement local du matériau

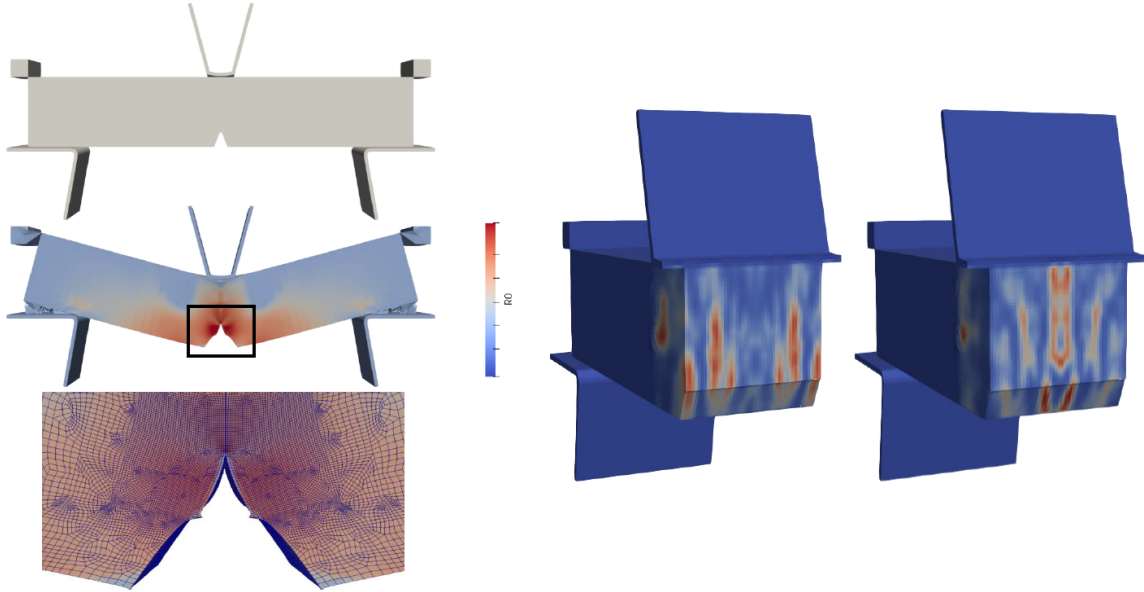


FIGURE 3 – Géométrie de l'éprouvette de résilience Charpy et déformation simulée au cours de l'essai (en haut à gauche). En bas à gauche, l'ouverture de fissure est représentée, modélisée par un « déboulonnage » progressif des nœuds du ligament. À droite, deux réalisations du champ aléatoire de ségrégation chimique, illustrées ici par une coupe dans la zone du ligament.

Le champ de ségrégation généré est inséré aux points de Gauss du maillage éléments finis de l'éprouvette Charpy, comme illustré sur la Figure 3. Il est toutefois nécessaire d'établir un lien entre le niveau de gris issu du réseau génératif et le comportement mécanique local du matériau. Dans cette étude, seule la limite d'élasticité R_0 est supposée dépendre du niveau de ségrégation, tandis que la forme de la loi d'écrouissage reste inchangée :

$$R(p) = R_0 + \tilde{R}(p), \quad p \text{ étant la plasticité cumulée.}$$

L'identification de la fonction $R_0(g)$, où $g \in [0, 1]$ désigne un niveau de gris, repose sur les résultats de micro-indentation présentés Figure 1 ainsi que sur des essais de traction réalisés sur l'acier ségrégué.

Dans un premier temps, la relation entre la dureté Vickers h et le niveau de gris g est obtenue par régression à partir des mesures de microdureté. Plutôt que d'utiliser des relations simplifiées pour relier directement la dureté à la limite d'élasticité, nous procédons de manière plus générale. Nous supposons que R_0 est linéairement reliée à la dureté h . Le coefficient de proportionnalité est déterminé en considérant que la variation relative de la dureté autour du centre de l'intervalle

$$\bar{h} = \frac{1}{2}(h^+ + h^-)$$

est similaire à celle de la limite d'élasticité autour de

$$\bar{R}_0 = \frac{1}{2}(R_0^+ + R_0^-).$$

La valeur de \bar{R}_0 est ensuite obtenue par analyse inverse : une simulation numérique d'un essai de traction est comparée à la courbe force-déplacement expérimentale, \bar{R}_0 étant l'unique paramètre ajusté. La fonction $R(p; g)$ ainsi obtenue est cohérente avec les hétérogénéités mésoscopiques observées.

2.1 Modèle de fissuration et de ruine

2.2 Fissuration ductile

La phase ductile de la fissuration de l'éprouvette Charpy est supposée déterministe. Elle est modélisée par un déboulonnage progressif des nœuds du ligament, représentant l'ouverture de fissure. Cette

évolution est décrite sous la forme d'une avancée de fissure a en fonction du déplacement imposé U . Elle est calibrée de manière à reproduire au mieux la courbe force–déplacement des essais de résilience, qui est peu dispersive (tout en étant interrompue prématurément pour les essais de faible ténacité).

Afin de prendre en compte les grandes rotations matérielles inhérentes à l'essai de résilience, le problème d'élasto-plasticité est résolu dans sa formulation corotationnelle.

2.3 Modèle statistique de rupture fragile de type "maillon-faible"

Nous utilisons pour le modèle de transition entre fissuration ductile et fragile un modèle de Bérémín.

$$P_r = 1 - \exp\left(-\left(\frac{\sigma_W}{\sigma_u}\right)^m\right)$$

$$\sigma_W(t) = \left[\int_{\Omega} (\sigma_I^*(t))^m \frac{\delta V}{V_0} \right]^{\frac{1}{m}} \quad \text{avec} \quad \sigma_I^*(t) = \max_{\{u < t; \dot{p}(u) > 0\}} \sigma_I(u)$$

L'un des points clés de l'étude est l'identification des paramètres de *forme* m et d'*échelle* σ_u de la loi de Weibull utilisée dans le modèle de Beremin. Ces paramètres sont estimés à partir d'une vingtaine d'essais de résilience réalisés dans différentes conditions de chargement, en ajustant les fonctions de répartition cumulée prédites par le modèle aux fonctions de répartition cumulée empirique construites à partir des données expérimentales.

Cette étape, particulièrement délicate en raison du choix des sollicitations expérimentales, sera présentée en détail au cours de l'exposé.

3 Résultats et perspectives.

Les résultats obtenus à l'aide du modèle présenté précédemment sont illustrés Figures 5 et 4.

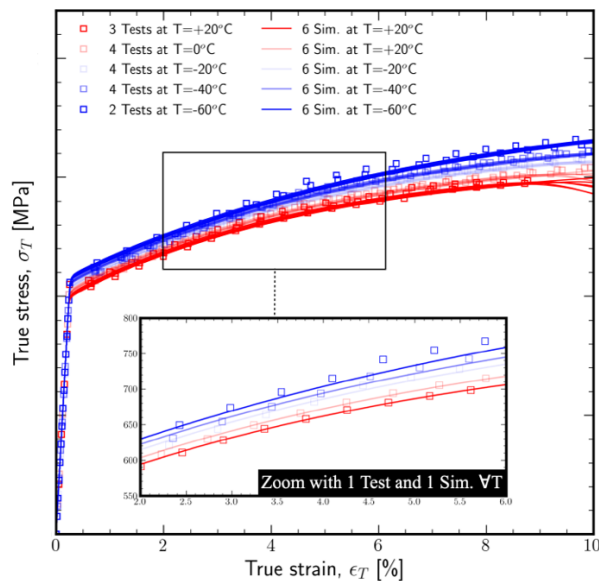


FIGURE 4 – Réponse force–déplacement simulée d'une éprouvette Charpy et comparaison aux résultats expérimentaux. Les différentes couleurs correspondent à différentes températures.

La courbe force–déplacement des essais de résilience est correctement reproduite pour l'ensemble des vitesses et des températures étudiées, ce qui confirme à la fois la validité du modèle d'évolution de la dureté avec la température (non détaillé dans ce résumé) et celle de la loi d'ouverture de fissure ductile utilisée dans la simulation.

La probabilité de rupture en fonction du déplacement de l'impacteur reproduit également de manière satisfaisante les tendances observées expérimentalement. Il est intéressant de noter qu'une partie de la variabilité totale est expliquée par les ségrégations chimiques : en effet, lorsque l'on considère plusieurs

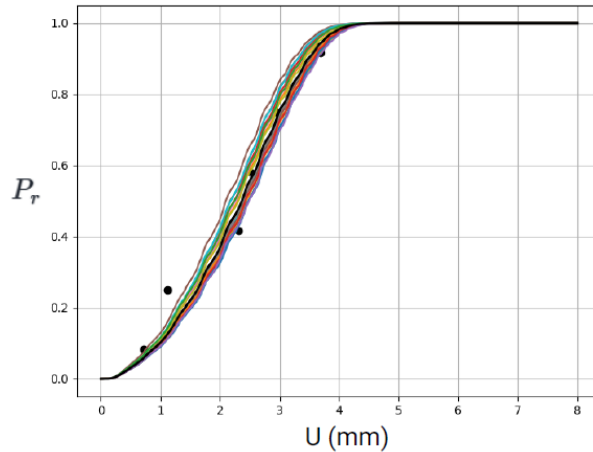


FIGURE 5 – Fonctions de répartition cumulées de la probabilité de rupture en fonction du déplacement de l’impacteur. Les différentes courbes correspondent différentes réalisations du champ de ségrégations chimiques.

réalisations du champ de ségrégation, on observe une dispersion des fonctions de répartition cumulées du déplacement à rupture.

Cette réduction de la variabilité reste toutefois modérée. Il convient de souligner que, dans cette première approche, la loi de rupture fragile n’est pas conditionnée par le niveau local de ségrégation chimique. Une dispersion plus marquée entre éprouvettes est donc attendue lorsque le paramètre σ_u sera, lui aussi, considéré comme un champ hétérogène. Il s’agit d’une perspective naturelle de ce travail.

Avertissement. L’IA générative a été utilisée pour améliorer la clarté, la fluidité et l’organisation du texte de cet article, ainsi que pour produire le résumé à partir d’une première ébauche rédigée manuellement.

Références

- [1] F. M. Beremin. *A Local Criterion for Cleavage Fracture of a Nuclear Pressure Vessel Steel* Metallurgical Transactions A, vol. 14A, pp. 2277–2287, 1983.
- [2] L. Oger et al. *Study of the relationships between microstructure and local mechanical properties in the ductile-to-brittle transition of a bainitic steel containing local segregations*. Materials Today Communications, 2023.
- [3] Y. Desnoyers, P. Masoudi, P. Joly, et E. Deneuwillers. *Metallographic characterization by variographic analysis and geostatistical simulation of local segregation microstructures in a heavy thickness forged part in SA508 Gr3 Cl2 type steel*, Proceedings of the 10th International Symposium “Contribution of Materials Investigations and Operating Experience to LWRs’ Safety, Performance and Reliability” (FONTEVRAUD 10), Avignon, France, 19–22 September 2022, 2022.
- [4] P. Joly, F. Roch, L. Sun, et E. Deneuwillers. *Study on the Effect of Local Segregations on the Charpy Impact Toughness Scatter; in RCC-M Code 18 and 20MND5 (SA 508 Gr3) Steel Grade Forgings for Nuclear Components*, Proceedings of the ASME 2023 Pressure Vessels & Piping Conference (PVP2023), Atlanta, Georgia, USA, July 16–21, 2023, paper PVP2023-106609, 2023.
- [5] P. Joly et al. *Metallographic characterization by variographic analysis and geo-statistical simulation of local segregation microstructures in a heavy thickness forged part in SA508 Gr3 Cl2 type steel*. Proceedings of the International Symposium on Contribution of Materials Investigations and Operating Experience to LWRs’ Safety, Performance and Reliability, Fontevraud 10, Avignon, France, September 19–22, 2022.
- [6] S. Kench & S. J. Cooper. *Generating three-dimensional structures from a two-dimensional slice with generative adversarial network-based dimensionality expansion*, Nature Machine Intelligence, Springer Nature, vol. 3(4), pp. 299–305, 2021.
- [7] K.-H. Lee and G. J. Yun. *Multi-plane denoising diffusion-based dimensionality expansion for 2D-to-3D reconstruction of microstructures with harmonized sampling*. arXiv preprint arXiv :2308.14035, 2023.
- [8] B. Tanguy. *Modélisation de l’essai Charpy par l’approche locale de la rupture : Application au cas de l’acier 16MND5 dans le domaine de transition*. Thèse de doctorat, École Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2001.

- [9] S. Wang et al. *In-situ deformation characterization of mesosegregated high-strength low-alloy steel*. *Materials Characterization*, vol. 169, p. 110627, 2020.