



**HAL**  
open science

## Étude de l'application des conditions aux limites lors d'un couplage EBSD/Microextensométrie/Eléments finis

Marie Dexet, Jérôme Crépin, Lionel Gélébart, Maxime Sauzay, André Zaoui

### ► To cite this version:

Marie Dexet, Jérôme Crépin, Lionel Gélébart, Maxime Sauzay, André Zaoui. Étude de l'application des conditions aux limites lors d'un couplage EBSD/Microextensométrie/Eléments finis. 17e Congrès Français de Mécanique, Aug 2005, Troyes, France. hal-00133703

**HAL Id: hal-00133703**

**<https://hal.science/hal-00133703>**

Submitted on 29 Sep 2023

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

# Etude de l'application des conditions aux limites lors d'un couplage EBSD/Microextensométrie/Eléments finis.

Marie Dexet<sup>\*,+</sup>, Jérôme Crépin<sup>\*</sup>, Lionel Gélébart<sup>+</sup>, Maxime Sauzay<sup>+</sup>, André Zaoui<sup>\*</sup>

<sup>\*</sup>Laboratoire de Mécanique des Solides (LMS) – Ecole Polytechnique  
91128 Palaiseau Cedex

<sup>+</sup>Service de Recherche de Métallurgie Appliquée (SRMA) - CEA Saclay  
91190 Gif-sur-Yvette  
dexet@lms.polytechnique.fr

## Résumé :

Cet article s'inscrit dans le développement d'une démarche d'identification des paramètres d'une loi de comportement cristalline utilisée pour des simulations numériques par éléments finis. Nous nous attacherons dans un premier temps, à décrire la méthode utilisée pour cette étude. Puis dans une seconde partie, l'accent sera mis sur la description d'un trajet de chargement réaliste lors des simulations numériques. Différentes façons d'appliquer les conditions aux limites expérimentales seront envisagées et discutées au travers des résultats des simulations numériques.

## Abstract :

This paper concerns the methodology for identification of crystalline constitutive law's parameter used in a finite elements simulation. In this paper, we will first have a close look to the method used for this study. Then, three different paths for applying the boundary conditions will be discuss.

## Mots clefs :

loi de comportement cristalline ; approche multi-échelle ; trajet de chargement.

## 1. Introduction

La maîtrise du comportement en service des gaines de combustible nucléaire en alliage de zirconium bute encore sur une connaissance insuffisante des mécanismes de déformation de ces alliages. Leur identification sur les seules réponses macroscopiques à partir de modèles polycristallins ayant montré ses limites, cette étude se propose d'utiliser une approche pour l'identification prenant en compte non seulement les réponses macroscopiques, mais aussi les mesures de champs de déformations réalisées à l'échelle des grains.

Une telle démarche semble tout à fait appropriée à l'étude des alliages de zirconium, car ceux-ci présentent un comportement plastique intragranulaire fortement anisotrope [1]. A chaud (280°C) et pour la texture considérée, ils présentent quatre systèmes de glissement potentiellement actifs, systèmes dont les cissons critiques et les mécanismes d'écrouissage sont encore mal connus. Une telle approche, mettant en jeu des connaissances macroscopiques et locales, permettra donc de mieux caractériser le comportement du matériau.

A l'aide d'un microscope électronique à balayage (MEB), nous allons pouvoir mesurer par microextensométrie, à l'échelle du grain, des champs de déplacement sur un motif multicristallin dont les orientations auront été préalablement obtenues par EBSD (Electron Back-Scattering Diffraction). Le développement et l'adaptation d'un outil de simulation numérique par éléments finis conçu lors d'études précédentes [2], nous permettront de réaliser, sur ce motif, un maillage adapté puis de le soumettre aux déplacements mesurés par corrélation d'images [3] de façon à pouvoir simuler le comportement du multicristal. D'autre part, l'application au contour du maillage des déplacements mesurés par

micro-tensométrie semble plus adéquate que l'application de conditions aux limites en déformations homogènes ( $\underline{U}(M) = \underline{E} \cdot \underline{M}$ ) car cette méthode permet de rendre compte de l'influence des grains voisins sur la zone considérée pour l'étude.

L'essai mécanique permet de déterminer à la fois les déplacements locaux à l'échelle de quelques microns et le comportement du matériau à l'échelle macroscopique, ainsi l'optimisation des paramètres de la loi de comportement utilisée pour la simulation numérique pourra se faire par comparaison entre les résultats issus de cette simulation et les résultats expérimentaux obtenus aux deux échelles. Il est à noter que cette méthodologie suppose l'utilisation d'un motif cristallin comprenant un Volume Élémentaire Représentatif. Nous nous attacherons dans un premier temps à décrire la méthodologie utilisée pour cette étude, puis une réflexion sur les conditions aux limites à appliquer à la simulation numérique sera présentée, se focalisant principalement sur l'obtention d'un trajet de chargement réaliste.

## 2. Principe de l'étude

### 2.1. Caractérisation du matériau

L'étude est menée sur des éprouvettes plates de traction en zirconium grade 702. A l'aide d'un microscope électronique à balayage (MEB), nous avons pu réaliser une caractérisation microstructurale du matériau par EBSD, qui nous a permis d'obtenir une cartographie des orientations cristallines (figure 1a) de la zone d'étude préalablement déterminée sur chaque éprouvette (zone centrale de l'éprouvette d'aire  $800 \times 800 \mu\text{m}^2$ , soit 640000 points). De plus, cette technique nous permet d'avoir accès à la texture fortement marquée du matériau (figure 1b).

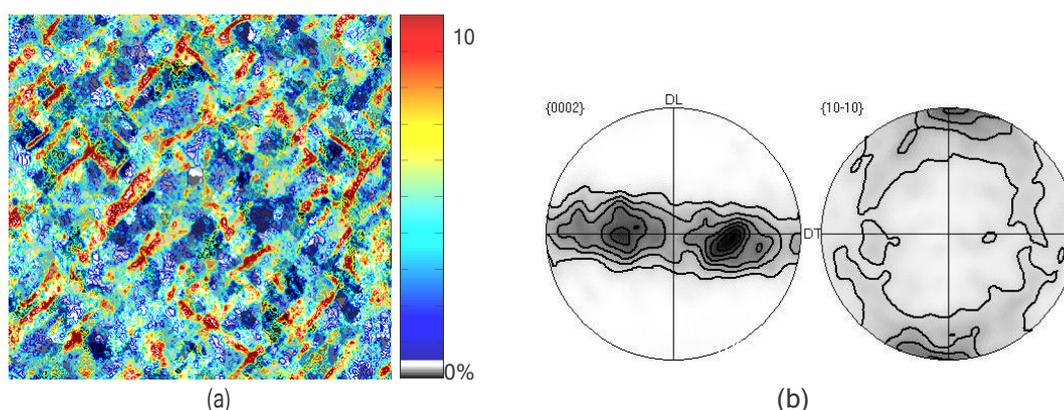


FIG. 1 - (a) Superposition des orientations cristallines obtenues par EBSD et du champ de déformation équivalente au sens de Von Mises (2D) par micro-tensométrie (b) Texture réalisée sur cette même zone (densité=0,94).

Un essai macroscopique de traction uniaxial instrumenté à chaud ( $c_{\text{total}} = 2,5\%$ ) nous permet d'avoir accès au comportement global du matériau. De plus, les éprouvettes étant munies de microgrilles d'or, déposées sur la surface par micro-lithographie préalablement à l'essai, nous avons ainsi accès, aux champs résiduels de déplacement surfaciques locaux et donc, à l'aide d'un schéma de dérivation discrète (schéma n°1 de l'article [4]) sur une base de mesure de  $4 \mu\text{m}$ , aux champs résiduels de déformation dans le plan de la microgrille (figure 1a). Cette mesure est assortie d'une incertitude de l'ordre de  $6 \cdot 10^{-3}$ . Nous remarquerons que ceci ne permet pas de mesurer des déformations élastiques, mais que cette méthode convient à notre étude car l'incertitude est faible au regard de l'hétérogénéité des déformations obtenues (0-10%).

### 2.2. Simulation numérique

Le maillage est basé sur la microgrille d'or. A chaque élément de microgrille (de taille  $2 \times 2 \mu\text{m}^2$ ) correspond un élément du maillage. Celui-ci est 3D comprenant un seul élément dans l'épaisseur qui est faible devant les autres dimensions. A chaque élément est associé l'orientation cristalline déterminée par l'analyse EBSD. La loi de comportement utilisée est une loi cristalline volumique [5], de type élasto-viscoplastique, définie et utilisée dans un premier temps sous l'hypothèse des petites perturbations.

Elle peut être décrite par une loi d'élasticité,  $\sigma_k = (\epsilon_k - \epsilon_k^{vp})$ , une loi de « normalité »,  $\epsilon_k^{vp} = \sum_s \mathcal{R}_s$ , où  $\mathcal{R}_s = \frac{1}{2} (m_s \otimes n_s + n_s \otimes m_s)$ , une loi d'écoulement,  $\dot{\epsilon}_k^{vp} = \sum_s \gamma_s \frac{\tau_s}{|\tau_s|} \left| \frac{\tau_s}{\tau_0} \right|^{n_s} \text{sgn}(\tau_s)$ , et enfin une loi d'écrouissage, ici limitée à un écrouissage linéaire afin de limiter le nombre de paramètres,  $\tau_{sk}^s = \sum_k h_{sk} \gamma_{sk}^k$  où  $h_{sk} = H_0 Q_{sk}$  et  $Q_{sk} = Q_{sk}^0 + (1 - Q_{sk}^0) \delta_{sk}$ .

Les conditions aux limites appliquées pour la simulation numérique sont les déplacements mesurés par microtensométrie aux nœuds de la microgrille, qui correspondent aux nœuds du maillage.

L'optimisation des paramètres de la loi de comportement utilisée est régie par la minimisation d'une fonction coût basée sur un calcul d'écart entre les paramètres mécaniques (Z et c) obtenus expérimentalement et ceux issus de la simulation numérique à la fois aux échelles locale et macroscopique. En effet, une erreur dite « locale », basée sur l'écart obtenu en tout point du maillage entre le tenseur de déformation plane issu de la simulation numérique ( $\epsilon^{sim}$ ) et celui issu de la corrélation d'image ( $\epsilon^{exp}$ ), est calculée. De même, une erreur dite « macroscopique » est déterminée, basée sur l'écart entre la valeur de la contrainte macroscopique mesurée sur la courbe expérimentale ( $Z_{exp}$ ) et la moyenne de la contrainte issue de la simulation sur le maillage considéré ( $Z_{sim}$ ). Ces deux erreurs composent la fonction coût que nous chercherons à minimiser en vue d'optimiser les paramètres de la loi de comportement utilisée.

Néanmoins, une telle démarche implique une description correcte du trajet de chargement au cours de la simulation numérique.

### 3. Etude des conditions aux limites

#### 3.1. Limitations observées

##### 3.1.1. Les conditions aux limites expérimentales

Différents problèmes ont été rencontrés lors de la mise en place de la simulation numérique. Pour des raisons expérimentales (essais macroscopiques), l'image de la microgrille déformée est prise lorsque l'éprouvette est déchargée, ce qui nous empêche de connaître les champs locaux correspondant à l'état b (figure 2a). Nous n'avons donc accès expérimentalement, qu'au champ de déplacement résiduel, (état c). Pour la simulation numérique, il nous faut donc introduire un champ complémentaire, nous permettant de décrire l'état b, puis de le faire évoluer vers l'état c. Ce champ doit être un champ compatible et admissible. Ce champ de déplacement est déterminé par une simulation numérique dans le régime élastique.

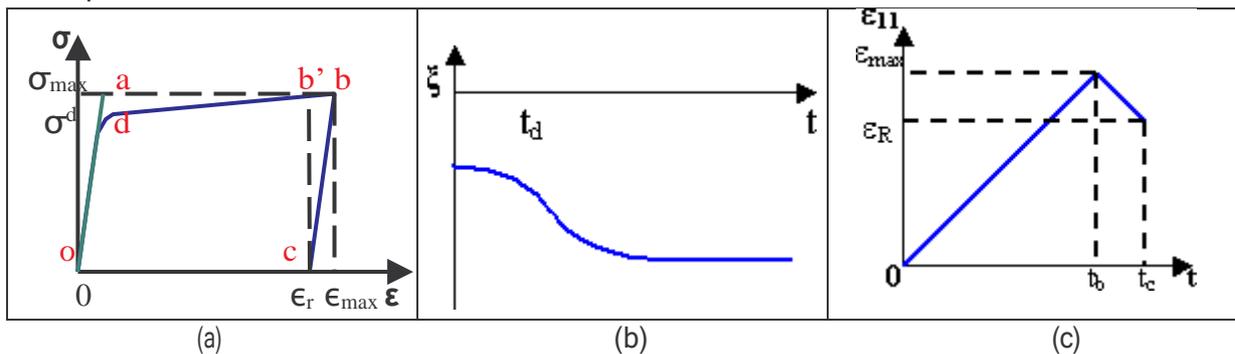


FIG. 2 - Schématisations du trajet de chargement

##### 3.1.2. Evolution des conditions aux limites

Une seconde difficulté se pose, celle-ci en terme de description du trajet de chargement.

Un calcul effectué en appliquant un chargement linéaire et proportionnel en fonction du temps, pour décrire le trajet o → b implique que le rapport ( $\langle \epsilon_{yy} \rangle / \langle \epsilon_{11} \rangle$ ) reste constant durant tout le chargement. Or expérimentalement lors d'un essai de traction uniaxial, ce rapport évolue au cours du chargement (figure 2b, évolution suivant le domaine en cours, élastique ou plastique). Le fait d'imposer un rapport de déformation constant, égal au rapport des déformations résiduelles (de l'ordre de -0,7), génère donc l'apparition de contraintes dans la direction transverse, notamment dans le domaine élastique où ce

rapport est expérimentalement de l'ordre de  $-0,36$ . Nous sommes donc confrontés à un problème de description du trajet de chargement.

## 3.2. Descriptions proposées

### 3.2.1. Description des conditions aux limites

Différentes solutions sont comparées afin de déterminer un trajet de chargement réaliste.

La prise en compte d'un champ complémentaire au contour du maillage est réalisée à l'aide d'un calcul élastique utilisant un chargement uniaxial en contrainte ( $\sigma = \sigma_{ma}$ ). Nous utilisons la loi cristalline élastoviscoplastique précédemment explicitée afin de tenir compte de l'anisotropie élastique du matériau. Le champ complémentaire introduit dans les conditions aux limites correspond alors à un champ calculé suivant le trajet  $o \rightarrow a$  (figure 2a).

Ainsi, au point b est appliquée la somme des déplacements expérimentaux et des déplacements issus d'un calcul élastique. Le trajet  $b \rightarrow c$  est simulé par retour aux seuls déplacements expérimentaux.

### 3.2.2. Evolution des trajets de chargement étudiés

Nous définissons préalablement  $U_{Ema}$  les déplacements aux contours issus de la simulation numérique correspondant au trajet  $o \rightarrow a$  (calcul élastique), et  $U_{Rma}$  les déplacements aux contours issus de la mesure par microtensométrie.

La première simulation numérique envisagée est une simulation comprenant un trajet de chargement linéaire et proportionnel où les déplacements sont appliqués de la façon suivante (figure 3a).

$$U(t) = (U_{Ema} + U_{Rma}) * f(t)$$

Et  $d(t)$  correspond à la décharge

$$U(t) = (U_{Ema} + U_{Rma}) * h(t)$$

Et  $d(t)$  correspond à la décharge

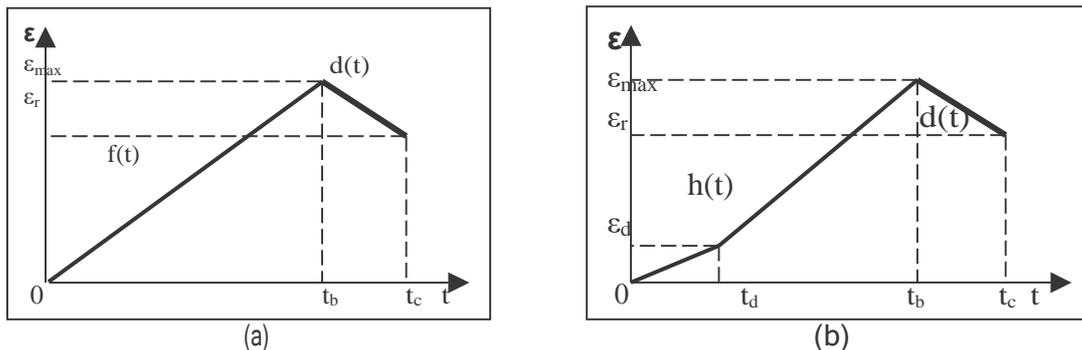


FIG. 3 - (a) premier trajet de chargement envisagé noté C1 (b) deuxième trajet de chargement envisagé noté C2

Indépendamment des niveaux de contrainte atteints en plasticité, on peut remarquer sur une comparaison simulation numérique/résultats expérimentaux (figure 4a), que pour cette simulation, la description du domaine élastique est mauvaise. En effet, le module d'Young observé avec ce chargement est trop faible (61GPa) par rapport aux résultats expérimentaux (91GPa).

Ceci provient de l'état de biaxialité qui est imposé sur la zone d'étude par des conditions aux limites proportionnelles. Sur la figure 4b, on peut observer pour cette première possibilité C1, que dans le domaine élastique la composante  $S_{22}$  de la contrainte n'est pas nulle. De plus, nous pouvons aussi observer une mauvaise description de l'évolution  $\epsilon(t)$  (figure 4c).

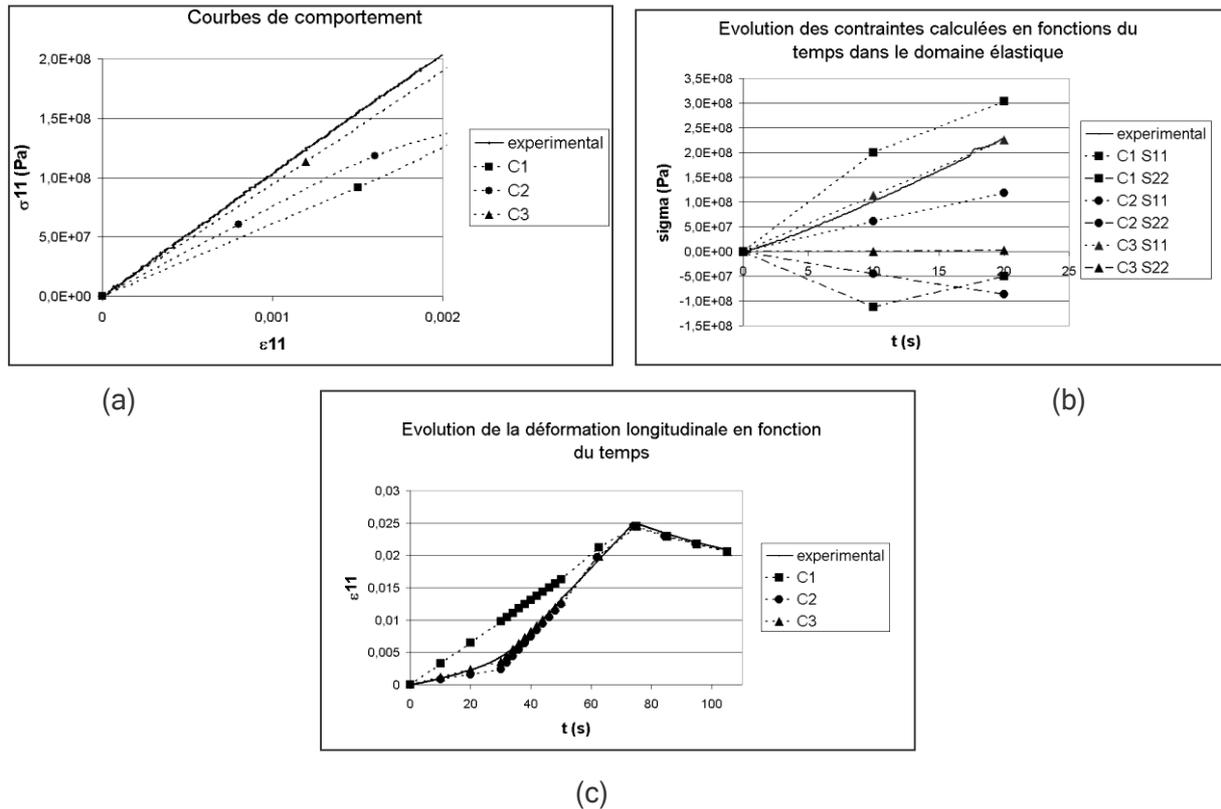


FIG.4 - Courbes de comportements issues de l'expérience et de la simulation numérique : (a) contrainte axiale en fonction de la déformation axiale, (b) contraintes axiale (S11) et transversale (S22) en fonction du temps, (c) déformation axiale en fonction de temps.

C'est pourquoi une seconde possibilité de chargement (figure 3b) est envisagée. Elle consiste à considérer un chargement proportionnel linéaire par morceau avec un changement de vitesse de chargement permettant de tenir compte des variations induites par un asservissement de l'essai en vitesse de déplacement de la traverse.

Ce chargement présente lui aussi l'inconvénient de la proportionnalité (problème de biaxialité du chargement), néanmoins la description de l'évolution  $\epsilon(t)$  (figure 4c) est meilleure que précédemment.

Enfin, la troisième possibilité de chargement (figure 5) permet de rendre compte d'un trajet de chargement non proportionnel [6]. Ce calcul est réalisé en deux étapes : une première étape concerne le domaine élastique (trajet o→d).

Jusqu'au temps, déterminé par la courbe de comportement,  $t_d$  (moment de l'entrée en plasticité à l'échelle macroscopique, (figure 2a)), les déplacements élastiques sont imposés jusqu'à une valeur de

$$U^e = U_{max}^e * \frac{\sigma_{exp}^d}{\sigma_{exp}^{max}}$$
, où  $\sigma_{exp}^d$  correspond à la valeur de la contrainte atteinte au temps  $t_d$ .

$$U(t) = U_{Ema} * f(t) + U_{Rma} * g(t) \quad [6]$$

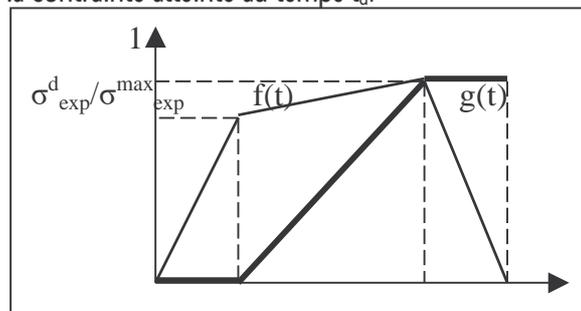


FIG. 5 - Trajet de chargement n°3 noté C3

Une seconde étape est ensuite réalisée (trajet d→b) pour laquelle les conditions aux limites correspondent à la somme des déplacements élastiques restants et des déplacements résiduels (mesurés par microélastométrie).

Cette solution nous permet d'envisager un chargement non proportionnel, offrant une description plus réaliste du domaine élastique sans problème de biaxialité (figure 4a la pente élastique est cohérente avec l'expérience, et, figure 4b, le chargement dans le domaine élastique est uniaxial) et une bonne description de l'évolution  $\epsilon(t)$  (figure 4c).

#### 4. Conclusion et perspectives

La confrontation des résultats issus des simulations numériques par éléments finis à ceux issus de l'expérience est très intéressante afin de prédire le comportement de matériau en service. La méthode d'identification décrite ici semble prometteuse car elle tient compte du comportement du matériau non seulement à l'échelle macroscopique, mais aussi à une échelle plus locale. Néanmoins, cette étude montre que l'application des conditions aux limites lors des simulations numériques n'est pas triviale si l'on veut réaliser un trajet de chargement réaliste, et la troisième solution présentée semble remplir cet objectif. Toutefois des calculs sont en cours de réalisation afin de vérifier l'influence de ces trajets sur les différentes cissions critiques résolues identifiées.

#### Remerciements

Ces travaux ont été réalisés dans le cadre du Contrat de Programme de Recherche « SMIRN », développé en collaboration entre EDF, le CEA et le CNRS.

#### Références

- [1] C. Pujol, Etude des mécanismes de déformation en traction et fluage de Zr entre 20 et 300°C, thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 1994.
- [2] S. Héraud, Du polycristal au multicristal : élaboration d'un mésoscope numérique pour une analyse locale en élastoviscoplasticité, thèse de doctorat, Ecole Polytechnique, 2000.
- [3] P. Doumalin, Microélastométrie locale par corrélation d'images numériques, application aux études micromécaniques par microscopie électronique à balayage, thèse de doctorat, Ecole Polytechnique, 2000.
- [4] L. Allais, M. Bornert, T. Bretheau, D. Caldemaison, Experimental characterization of local strain field in a heterogeneous elastoplastic material, Acta. Metall. Mater., vol. 42, n°11, pp. 3865-3880, 1994.
- [5] R. Brenner, Influence de la microstructure sur le comportement en fluage thermique d'alliages de zirconium : analyse expérimentale et mise en œuvre de méthodes d'homogénéisation, thèse de doctorat, Université Paris XIII, 2001.
- [6] L. Gélébart, J. Crépin, M. Delet, M. Sauzay, A. Roos, Identification of Crystalline behaviour on Macroscopic Response and local strain field analysis, Proceedings « 14th Symposium on Zirconium in the Nuclear Industry », Stockholm, June 2004.