



HAL
open science

Identification de la loi de comportement cristallin du Zirconium à partir de la réponse locale et globale d'un polycristal

Halim Haddadi, Abdellah Salahouelhadj

► **To cite this version:**

Halim Haddadi, Abdellah Salahouelhadj. Identification de la loi de comportement cristallin du Zirconium à partir de la réponse locale et globale d'un polycristal. 8e Colloque national en calcul des structures, CSMA, May 2007, Giens, France. hal-01495800

HAL Id: hal-01495800

<https://hal.science/hal-01495800v1>

Submitted on 26 Mar 2017

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.

Public Domain

Identification de la loi de comportement cristallin du Zirconium à partir de la réponse locale et globale d'un polycristal

H. Haddadi et A. Salahouelhadj

*CNRS-LPMTM (UPR 9001) – Université Paris 13 – Institut Galilée
99, avenue J.-B. Clément, 93430 Villetaneuse, France
haddadi@lpmtm.univ-paris13.fr*

RÉSUMÉ. Le but de ce travail est l'identification des paramètres de la loi de comportement cristallin du Zirconium grade 702 en minimisant une fonction coût globale qui représente la somme pondérée de deux fonctions coût. La première fonction représente l'écart entre la courbe $\sigma - \varepsilon$ expérimentale macroscopique et celle provenant d'un calcul EF polycristallin réalisé sur un VER. La deuxième fonction coût représente l'écart entre les champs de déformations expérimentaux mesurés par corrélation d'images de microgrilles, et ceux simulés sur une microstructure réelle caractérisée par EBSD.

ABSTRACT. The aim of this study is the identification of the parameters of the crystalline behavior law of Zirconium by minimizing a global cost function which is the sum of two cost functions. The first function represents the difference between the experimental macroscopic stress-strain curve and the one coming from a crystalline finite element calculation realized on a RVE. The second cost function represents the difference between the experimental strain fields by digital image correlation technique of deformed micro-grids, and those simulated on a real microstructure characterized by EBSD.

MOTS-CLÉS : Identification, Polycristal, Méthode des Eléments Finis, Elastoviscoplasticité.

KEYWORDS: Identification; Polycrystals ; Finite Element Analysis; Elastoviscoplasticity.

1. Introduction

L'utilisation de la plasticité cristalline a un grand intérêt pour la prédiction de la localisation de la déformation, car elle prend en compte l'anisotropie du comportement local du matériau. Plusieurs travaux sont faits dans ce sens. Hoc et al. [1] ont identifiés les paramètres d'une loi de comportement cristalline pour l'acier ARMCO en utilisant la courbe expérimentale contrainte-déformation et une fonction de la distribution de la déformation axiale obtenue à partir de mesure de champs provenant d'un essai de traction d'une éprouvette multicristalline contenant 27 grains.

Le but de ce travail est l'identification des paramètres de la loi de comportement cristallin du Zirconium grade 702. Ces paramètres sont identifiés en minimisant une fonction coût représentant l'écart entre le modèle et l'expérience pour les réponses globale et locale.

2. Modèle de comportement monocristallin

Le Zirconium est un matériau à structure hexagonale compacte, il présente cinq familles de systèmes de glissement facile. Trois systèmes basaux $\{0001\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$, trois systèmes prismatiques $\{\bar{1}010\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$, six systèmes pyramidaux de type $\langle a \rangle$ $\{10\bar{1}0\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$, douze systèmes pyramidaux de type $\langle c+a \rangle$ de première espèce $\{10\bar{1}0\} \langle 11\bar{2}3 \rangle$, ainsi que six systèmes pyramidaux $\langle c+a \rangle$ de deuxième espèce $\{1122\} \langle 11\bar{2}3 \rangle$. Dans ce travail, le glissement sur les systèmes pyramidaux $\langle c+a \rangle$ de deuxième espèce est négligé, et le maclage n'est pas pris en compte. On suppose que le comportement de ce matériau est élastoviscoplastique. Le modèle de comportement cristallin retenu est celui utilisé par Balasubramanian et Anand [2]. La vitesse de glissement sur le système α suit une loi puissance :

$$\dot{\gamma}^{\alpha} = \dot{\gamma}_0 \left(\frac{|\tau^{\alpha}|}{s^{\alpha}} \right)^{1/m} \text{sgn}(\tau^{\alpha}) \quad (1)$$

où τ^{α} et s^{α} sont respectivement la cission résolue et la résistance à la déformation du système de glissement α , $\dot{\gamma}_0$ est une vitesse de glissement arbitraire et m est le coefficient de sensibilité à la vitesse de déformation.

La loi d'évolution de s^{α} est donnée par les relations :

$$\dot{s}^{\alpha} = \sum_{\beta=1}^{24} h^{\alpha\beta} |\dot{\gamma}^{\beta}| \quad \text{avec} \quad s^{\alpha} = s_0^{\alpha} \quad \text{à} \quad t = 0, \quad (2)$$

et

$$h^{\alpha\beta} = q^{\alpha\beta} h^{\beta} \quad \text{avec} \quad q^{\alpha\beta} = \begin{cases} 1 & \text{si } \alpha \text{ et } \beta \text{ sont coplanaires} \\ q & \text{si } \alpha \text{ et } \beta \text{ ne sont pas coplanaires} \end{cases} \quad (3)$$

où h^{β} est taux d'auto-écrouissage du système de glissement β , et $q^{\alpha\beta}$ est la matrice d'écrouissage.

Le taux d'auto-écrouissage h^{β} est donné par l'équation :

$$h^{\beta} = h_0 \left| 1 - \frac{s^{\beta}}{s_s^{\beta}} \right|^r \text{sgn} \left(1 - \frac{s^{\beta}}{s_s^{\beta}} \right) \quad \text{avec} \quad s_s^{\beta} = \tilde{s} \left(\frac{\dot{\gamma}^{\beta}}{\dot{\gamma}_0} \right)^n \quad (4)$$

où h_0 est un facteur d'écrouissage et s_s^{β} est la valeur de s^{β} à saturation.

Les constantes élastiques du zirconium à une température de 280°C ont été mesurées par Fisher et Renken [3]. Leurs valeurs sont : $C_{11}=130.1$ GPa, $C_{33}=155.9$ GPa, $C_{44}=28.2$ GPa, $C_{12}=78.6$ GPa, $C_{13}=65.7$ GPa.

3. Identification des paramètres du modèle cristallin

A partir d'un essai de traction [4], nous disposons des données expérimentales suivantes : (i) la texture et la microstructure initiales grâce à l'EBS (Electron Back-Scattering Diffraction), (ii) la réponse macroscopique $\sigma - \varepsilon$ et (iii) les champs locaux de déformation obtenus par corrélation d'images numériques de microgrilles d'or déposées à la surface de la zone d'étude qui mesure $80 \times 80 \mu\text{m}^2$ et contient 61 grains (cf. Fig.2.a). Les conditions aux limites appliquées sont de type déplacement de bloc correspondant à une traction simple suivant la direction x jusqu'à une déformation logarithmique finale de 2,5%. La contrainte moyenne sur les surfaces latérales étant nulle. La vitesse de déformation moyenne est celle de l'essai qui vaut $4 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$. Les simulations éléments finis ont été réalisées avec le code Meso3D développé dans le laboratoire LPMTM en collaboration avec le LMS de l'école polytechnique [5-10].

La réponse macroscopique est simulée sur un VER dont la taille a été préalablement déterminée par une étude sur la dispersion de la réponse globale [9, 10]. La réponse locale est simulée sur une microstructure dont la morphologie initiale provient de la cartographie EBS.

L'identification est réalisée en minimisant une fonction coût globale définie par :

$$f(\mathbf{P}) = \eta f_G(\mathbf{P}) + (1 - \eta) f_L(\mathbf{P}) \quad (5)$$

où $\eta=0.8$ est un paramètre de pondération, \mathbf{P} est le jeu de paramètres du modèle cristallin, $f_G(\mathbf{P})$ représente l'écart entre la réponse globale expérimentale et celle simulée dont l'expression est donnée par :

$$f_G(\mathbf{P}) = \frac{1}{n_p} \sum_{i=1}^{n_p} \left(\frac{\sigma^{sim}(\mathbf{P}, \varepsilon_i) - \sigma^{exp}(\varepsilon_i)}{\sigma^{exp}(\varepsilon_i)} \right)^2 \quad (6)$$

où n_p est le nombre de points de la courbe expérimentale. ε_i , $\sigma^{exp}(\varepsilon_i)$ et $\sigma^{sim}(\mathbf{P}, \varepsilon_i)$ sont respectivement la déformation, la contrainte mesurée et la contrainte simulée correspondant au $i^{\text{ème}}$ point de mesure de la courbe expérimentale.

$f_L(\mathbf{P})$ est l'écart entre la réponse locale expérimentale et celle simulée. Cet écart est défini par :

$$f_L(\mathbf{P}) = \frac{0.6}{m_p} \sum_{j=1}^{m_p} \left(\frac{\varepsilon_{xx}^{sim}(\mathbf{P}, \mathbf{x}_j) - \varepsilon_{xx}^{exp}(\mathbf{x}_j)}{\varepsilon_{xx}^{exp}(\mathbf{x}_j)} \right)^2 + \frac{0.4}{m_p} \sum_{j=1}^{m_p} \left(\frac{\varepsilon_{yy}^{sim}(\mathbf{P}, \mathbf{x}_j) - \varepsilon_{yy}^{exp}(\mathbf{x}_j)}{\varepsilon_{yy}^{exp}(\mathbf{x}_j)} \right)^2 \quad (7)$$

où m_p est le nombre de points où la déformation a été mesurée. \mathbf{x}_j , $\varepsilon_{xx}^{sim}(\mathbf{P}, \mathbf{x}_j)$, $\varepsilon_{xx}^{exp}(\mathbf{x}_j)$, $\varepsilon_{yy}^{sim}(\mathbf{P}, \mathbf{x}_j)$ et $\varepsilon_{yy}^{exp}(\mathbf{x}_j)$ représentent respectivement la position, les déformations axiales simulée et expérimentale, les déformations transverses simulée et expérimentale correspondant au $j^{\text{ème}}$ point de mesure des champs de déformation.

Les systèmes de glissements actifs observés après l'essai sont les systèmes prismatiques et les systèmes pyramidaux $\langle a \rangle$. Pour cela, nous identifions s_0^{prism} et $s_0^{pyr\langle a \rangle}$, les autres valeurs de s_0 sont maintenues à 800 MPa. Quant aux valeurs de $\tilde{s}^{pyr\langle c+a \rangle}$ et \tilde{s}^{basal} sont fixées à 2000 MPa. L'absence d'informations dans la littérature concernant l'interaction entre les différents systèmes de glissement, nous a amené à considérer que $q = 1$. Le paramètre $\dot{\gamma}_0$ est fixé à 0.001 s^{-1} . Les valeurs des huit autres paramètres identifiés sont : $r = 1.2$, $m = 9.9$, $n = 0.1$, $h_0 = 72.1 \text{ MPa}$, $s_0^{prism} = 26.8 \text{ MPa}$, $s_0^{pyr\langle a \rangle} = 36.1 \text{ MPa}$, $\tilde{s}^{prism} = 1024 \text{ MPa}$, $\tilde{s}^{pyr\langle a \rangle} = 1486 \text{ MPa}$.

La figure 1 montre que la réponse globale est bien reproduite. Quant à la figure 2, elle indique une meilleure prédiction du champ ε_{22} par rapport à celle du champ ε_{11} . L'utilisation d'une base de mesure de la déformation de $2 \mu\text{m}$ ne nous permet pas de dire si les fortes fluctuations observées sur les cartographies proviennent d'un bruit de mesure ou si le maillage éléments finis n'est pas assez fin pour reproduire ces mêmes fluctuations.

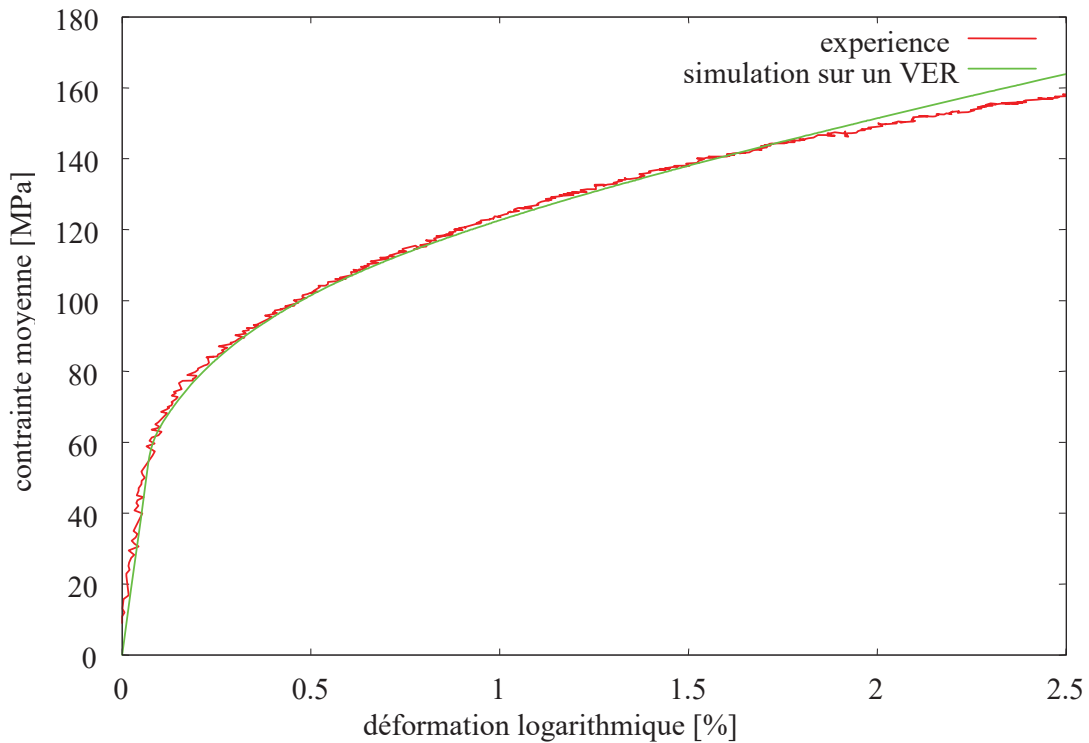


Fig.1 Courbe de la réponse globale expérimentale $\sigma - \varepsilon$ et celle simulée sur un VER avec le jeu de paramètres identifié.

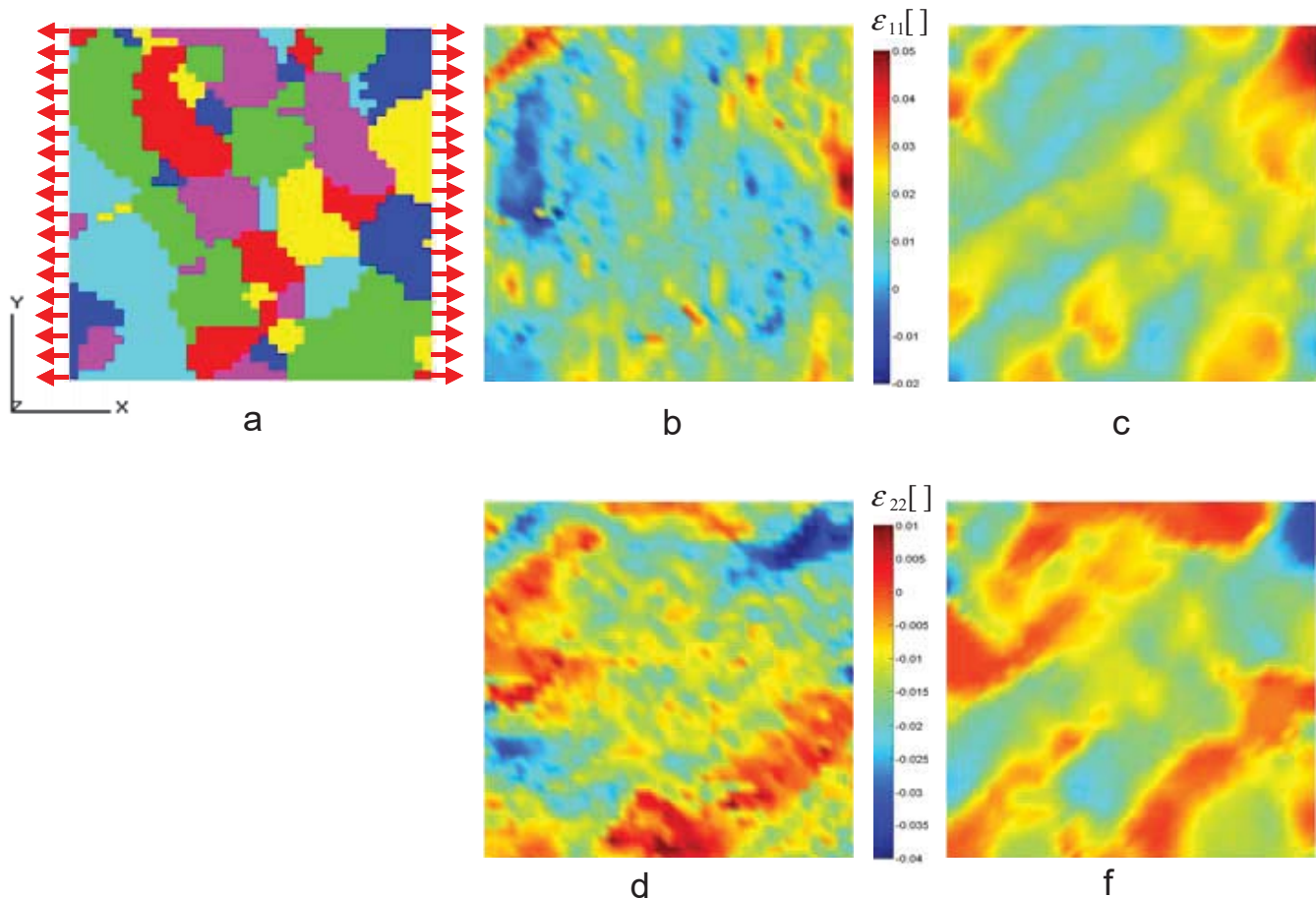


Fig. 2. Zone d'étude $80 \times 80 \mu\text{m}^2$ composée de 61 grains : a) morphologie des grains (EBSD). Champs de la déformation ε_{11} b) expérimental et c) simulé. Champs de la déformation ε_{22} : d) expérimental et e) simulé.

4. Conclusion

On a identifié le jeu de paramètres pour le modèle cristallin d'un Zirconium grade 702 en utilisant la réponse macroscopique et les champs des déformations mesurés par corrélation d'images de microgrilles. La confrontation des résultats de la simulation numérique par éléments finis à ceux de l'expérience donne un bon accord sur la courbe de traction. Concernant les champs locaux, les résultats sont encourageants. Une amélioration devrait être obtenue par une meilleure prise en compte des conditions aux limites réelles en utilisant les déplacements expérimentaux sur les bords du motif étudié et des maillages plus fins.

5. Remerciements

Les auteurs tiennent à remercier J. Crépin (LMS-Ecole Polytechnique) et M. Dexet (LMS et SRMA -CEA) pour les résultats expérimentaux qu'ils nous ont fournis.

6. Bibliographie

[1] T. Hoc, J. Crépin, L. Gélébart, and A. Zaoui. A procedure for identifying the plastic behavior of single crystals from the local response of polycrystals. *Acta Materialia*, 51(18):5477-5488, 2003.

[2] S. Balasubramanian and L. Anand. Plasticity of initially textured hexagonal polycrystals at high homologous temperatures: application to titanium. *Acta Materialia*, 50, 133 -148, 2002.

[3] E. S. Fisher and C. J. Renken. Single-Crystal elastic moduli and the hcp -> bcc transformation in Ti, Zr and Hf. *Physical Review*, 135, 2A, 482-494, 1964.

[4] M. Dexet. Méthode de couplage expérimentations-simulations numériques en vue de l'identification de loi de comportement cristalline. application aux alliages de zirconium. Thèse de doctorat, Ecole Polytechnique, Palaiseau, France, 2006.

[5] S. Héraud, L. Allais, H. Haddadi, C. Teodosiu, and A. Zaoui. Du polycristal au multicristal : vers un mesoscope numérique. *Journal de Physique IV*, PR4:27.32, 1998.

[6] H. Haddadi, S. Héraud, L. Allais, C. Teodosiu, and A. Zaoui. A "numerical mesoscope" for the investigation of local fields in rate-dependent elastoplastic materials at finite strain. In editor C. Miehe, editor, IUTAM Symposium on "Computational Mechanics of Solid Materials at Large Strains, 311-320, Stuttgart, Germany, 2001.

[7] A. Salahouelhadj, H. Haddadi, M. Gaspérini, vers une amélioration de la prévision des champs mécaniques locaux dans les polycristaux", Congrès Français de la Mécanique, 29 août au 2 septembre 2005, Troyes.

[8] A. Salahouelhadj, H. Haddadi, M. Gaspérini, "Utilisation du principe du mesoscope numérique pour l'amélioration de la prévision des champs mécaniques locaux dans les polycristaux", Colloque Plasticité 2006, 27-29 mars 2006, Annecy.

[9] A. Salahouelhadj, H. Haddadi, M. Gaspérini, " Homogénéisation par Eléments Finis du Comportement Mécanique de Polycristaux Métalliques ", Matériaux 2006, 13-17 novembre 2006, Dijon.

[10] A. Salahouelhadj, H. Haddadi, M. Gaspérini, " Homogenization of the Mechanical Behavior of Metallic Polycrystals by Finite Element Method ", International Conference on Advances in Mechanical Engineering and Mechanics (ICAMEM 2006), 17-19 décembre 2006, Tunisie.