MFRON03 – Test de l'interface *Code_Aster-MFront* pour des lois cristallines

Résumé :

Ce test valide des comportements orthotrope définis à l'aide de *MFront* par comparaison avec des comportements similaires de *Code_Aster*.

Modélisation B : cette modélisation permet de valider le modèle élasto-visco-plastique monocristallin avec intégration implicite, par comparaison au modèle MONOCRISTAL sur un point matériel.

Modélisation C : cette modélisation permet de valider le modèle élasto-visco-plastique monocristallin avec intégration implicite, et définition complète de la famille de systèmes de glissement et de la matrice d'interaction, par comparaison au modèle MONOCRISTAL de Code_Aster sur un agrégat à 10 grains.

Modélisation D : cette modélisation permet de valider le modèle élasto-visco-plastique polycristallin avec intégration explicite, par comparaison au modèle POLYCRISTAL sur un point matériel avec 30 grains.

Modélisation E : cette modélisation permet de valider le modèle élasto-visco-plastique monocristallin de type `DD_CFC` sur un point matériel.

Modélisation F : cette modélisation permet de valider le modèle élasto-visco-plastique polycristallin homogénéisé de type `DD_CFC` sur un point matériel avec 30 grains.

Modélisation G : cette modélisation permet de valider le modèle élasto-visco-plastique monocristallin de type `DD_CFC_IRRA` sur un point matériel.

Modélisation H : cette modélisation permet de valider le modèle élasto-visco-plastique monocristallin homogénéisé de type `DD_CC` sur un point matériel.

Modélisation I : cette modélisation permet de valider le modèle élasto-visco-plastique monocristallin de type `DD_CC_IRRA` sur un point matériel.

Modélisation J : cette modélisation permet de valider le modèle élasto-visco-plastique monocristallin en grandes déformations.

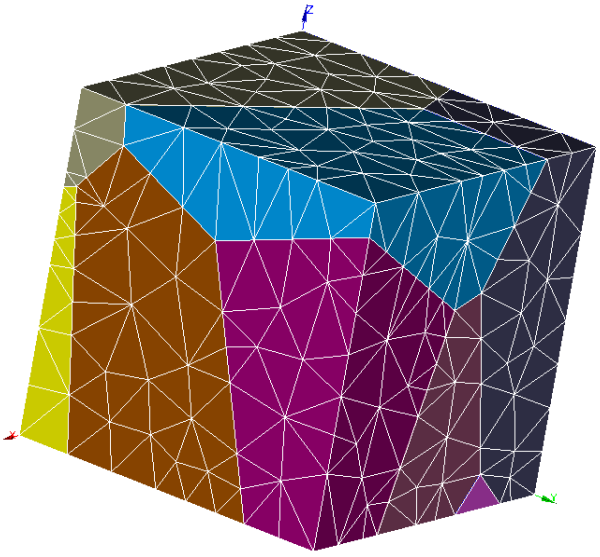
Modélisation K : cette modélisation permet de valider le modèle élasto-visco-plastique polycristallin homogénéisé de type `DD_CC` sur un point matériel avec 30 grains.

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

1 Problème de référence

1.1 Géométrie

La géométrie de la modélisation C est celle d'un agrégat à 10 grains générée par une procédure python basée sur des cellules de Voronoï. On définit des plans de coupe aux bords pour imposer les conditions aux limites.



Les autres modélisations sont effectuées sur points matériels (SIMU_POINT_MAT).

1.2 Propriétés des matériaux

1.2.1 Modélisation B : monocristal

Cette modélisation permet de valider le modèle élasto-visco-plastique monocristallin avec intégration implicite, par comparaison au modèle MONOCRISTAL sur un point matériel.
Les coefficients matériaux sont :

E	208000
NU	0,3
G	80000
N	10
K	25
C	14363
R_0	66,62
Q	11,43
B	2,1
D	494

Les fichiers Mfront définissant le comportement sont :
MonoCrystal_CFC.mfront

1.2.2 Modélisation C : monocristal sur un agrégat de 10 grains

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

Cette modélisation permet de valider le modèle élasto-visco-plastique monocristallin avec intégration implicite, et définition complète de la famille de systèmes de glissement et de la matrice d'interaction, par comparaison au modèle MONOCRISTAL sur un agrégat à 10 grains.
Les coefficients matériaux sont :

E	210000
NU	0,3
G	80769.23
N	12
K	5
C	0
R_0	250
Q	55
B	12
D	0

Les fichiers Mfront définissant le comportement sont :

MonoCrystal_CFC.mfront

1.2.3 Modélisation D : polycristal homogénéisé sur 30 grains

Cette modélisation permet de valider le modèle élasto-visco-plastique polycristallin avec intégration explicite, par comparaison au modèle POLYCRISTAL sur un point matériel avec 30 grains. Les coefficients matériaux sont :

E	145200
NU	0,3
G	55846.15
N	10
K	40
C	0
R_0	75,5
Q	9,77
B	19,34
D	0

Les fichiers Mfront définissant le comportement sont :

PolyCrystal_MC.mfront

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

PolyCrystal_Orientation.mfront

Le fichier « PolyCrystal_Orientation.mfront » définit 30 triplets d'angles d'Euler en degrés.

1.2.4 Modélisation E : monocristal DD_CFC

Cette modélisation permet de valider le modèle monocristallin DD_CFC sur un point matériel, par comparaison avec MONO_DD_CFC. Les coefficients matériaux sont :

E	208000
NU	0,3
G	80000
TAU_F	105
Y	2.5E-7
N	5
GAMMA_0	1.E-3
A	0,13
B	0,005
RHOREF	1.E6
ALPHA	0,35
BETA	2,54E-7
G	80000

La densité de dislocation initiale vaut 1.E6. La solution analytique est contenue dans le fichier mfron03e.30. Les fichiers Mfront définissant le comportement sont :
MonoCrystalDDCFC.mfront
MonoCrystal_DD_CFC_InteractionMatrix.mfront

1.2.5 Modélisation F : polycristal homogénéisé de type DD_CFC sur 30 grains

Cette modélisation permet de valider le modèle polycristallin homogénéisé DD_CFC sur un point matériel avec 30 grains, par comparaison avec POLYCRISTAL. Les coefficients matériaux sont :

E	208000
NU	0,3
G	80000
TAU_F	80
Y	2.5E-7
N	20
GAMMA_0	1.E-3
A	0,13
B	0,005
RHOREF	1.E6
ALPHA	0,35
BETA	2,54E-7

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

G	80000

La densité de dislocation initiale vaut 1.E5. Les fichiers Mfront définissant le comportement sont :
PolyCrystalDDCFC.mfront
MonoCrystal_DD_CFC_InteractionMatrix.mfront
Le fichier « PolyCrystal_Orientation.mfront » définit 30 triplets d'angles d'Euler en degrés.

1.2.6 Modélisation G : monocristal DD_CFC_IRRA

Cette modélisation permet de valider le modèle DD_CFC_IRRA sur un point matériel, par comparaison avec le comportement MONO_DD_CFC_IRRA. Les coefficients matériaux sont :

E	208000
NU	0,3
G	80000
TAU_F	80
Y	2.5E-7
N	20
GAMMA_0	1.E-3
A	0,13
B	0,005
RHOREF	1.E6
ALPHA	0,35
BETA	2,54E-7
G	80000
ome_void	1000,
PHI_LOOP	5,9E-6
ALP_VOID	0
ALP_LOOP	0,1
ome_sat	0
PHI_SAT	4,E-2
XI_IRRA	10
DZ_IRRA	1,E7

Les variables internes initiales sont :
RHO_0=1,E5
RHO_LOOPS=7,4E13
PHI_VOIDS=1.e-3

Les fichiers Mfront définissant le comportement sont :
MonoDDCFC_Irra.mfront
MonoCrystal_DD_CFC_InteractionMatrix.mfront

1.2.7 Modélisation H : monocristal DD_CC

Cette modélisation permet de valider le modèle DD_CC sur un point matériel, par comparaison avec le comportement MONO_DD_CC du test ssnd110b. Les coefficients matériaux sont :

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

E (GPa)	236-0.0459*TEMP
NU	0,35
G	80000
B	2,48e-7
GH	1.e11
DeltaG0	0,84
TAU_0 (MPa)	363
TAU_F	0
gamma0	1,e-6
n	50
rho_ini	1,e5*B**2
D	1.e-5
d_lat	1000.
y_at	2.e-6
K_f	30,
K_self	100
k_boltz	8.62E-5
epsi_1	3e-4
G	80000
a_self	0,1024
a_coli	0,7
a_ncol	0,1

La température de la simulation vaut 50 K.

La densité de dislocation initiale vaut 1.E5 (multipliée par BETA**2).

Les fichiers Mfront définissant le comportement sont :

```
MonoCrystalDDCC.mfront
MonoCrystal_DD_CC_InteractionMatrix.mfront
MonoCrystal_DD_CC_SlidingSystems.mfront
```

Le monocristal est défini suivant l'orientation -1,4,9. Il est soumis à une déformation imposée ε_{zz} .

1.2.8 Modélisation I : monocristal DD_CC_IRRA

Cette modélisation permet de valider le modèle DD_CC_IRRA sur un point matériel, par comparaison avec le comportement MONO_DD_CC_IRRA du test ssnd110d. Les coefficients matériaux sont :

E (GPa)	236-0.0459*TEMP
NU	0,35
G	80000
B	2,48e-7
GH	1.e11

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

DeltaG0	0,84
TAU_0 (MPa)	363
TAU_F	20
gamma0	1,e-3
n	20
rho_ini	1,e5*B**2
D	1.e-5
d_lat	1000.
y_at	1.e-6
K_f	30,
K_self	100
k_boltz	8.62E-5
epsi_1	1e-5
G	80000
a_irr	0,3
xi_irr	4
a_self	0,1024
a_coli	0,7
a_ncol	0,1

La température de la simulation vaut 250 K.
Le monocristal est soumis à une traction imposée suivant l'orientation 1,5,9
La densité de dislocation initiale vaut 1.E5 (multipliée par BETA**2). Les fichiers Mfront définissant le comportement sont :
MonoDDCC_Irra.mfront
MonoCrystal_DD_CC_InteractionMatrix.mfront
MonoCrystal_DD_CC_SlidingSystems.mfront

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

1.2.9 Modélisation J : monocristal en grande déformation

Cette modélisation permet de valider le modèle monocristallin en grande déformation sur un point matériel, par comparaison avec le comportement MONOCRISTAL du test ssnd112a. Les coefficients matériaux sont :

N__	10.
K__	25.0
C__	14363.
R_0__	66.62
Q__	11.43
B__	2.1
D__	494.
H1__	1.
H2__	1.
H3__	0.6
H4__	12.3
H5__	1.6
H6__	1.8

Les fichiers Mfront définissant le comportement sont :
GdefMonoCrystal.mfront
GdefMono_Jacnum.mfront

1.2.10 Modélisation K : polycristal homogénéisé DD_CC

Cette modélisation permet de valider le modèle polycristallin homogénéisé DD_CC sur un point matériel avec 30 grains, par comparaison avec le comportement POLYCRISTAL du test ssnv194d. Les coefficients matériaux sont :

E (GPa)	236-0.0459*TEMP
NU	0,35
G	80000
B	2,48e-7
GH	1.e11
DeltaG0	0,84
TAU_0 (MPa)	363
TAU_F	0
gamma0	1,e-6
n	50
rho_ini	1,e5*B**2
D	1.e-5
d_lat	1000.
y_at	2.e-6
K_f	30,
K_self	100

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

k_boltz	8.62E-5
epsi_1	3e-4
G	80000
a_self	0,1024
a_coli	0,7
a_ncol	0,1

Les fichiers Mfront définissant le comportement sont :
PolyCrystalDDCC.mfront
PolyCrystal_DD_CC_SlidingSystems.mfront
MonoCrystal_DD_CC_InteractionMatrix.mfront

2 Solution de référence

Valeurs des contraintes, déformations et variables internes, par inter-comparaison entre chaque comportement Mfront et le comportement équivalent de Code_Aster.

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

3 Modélisation B

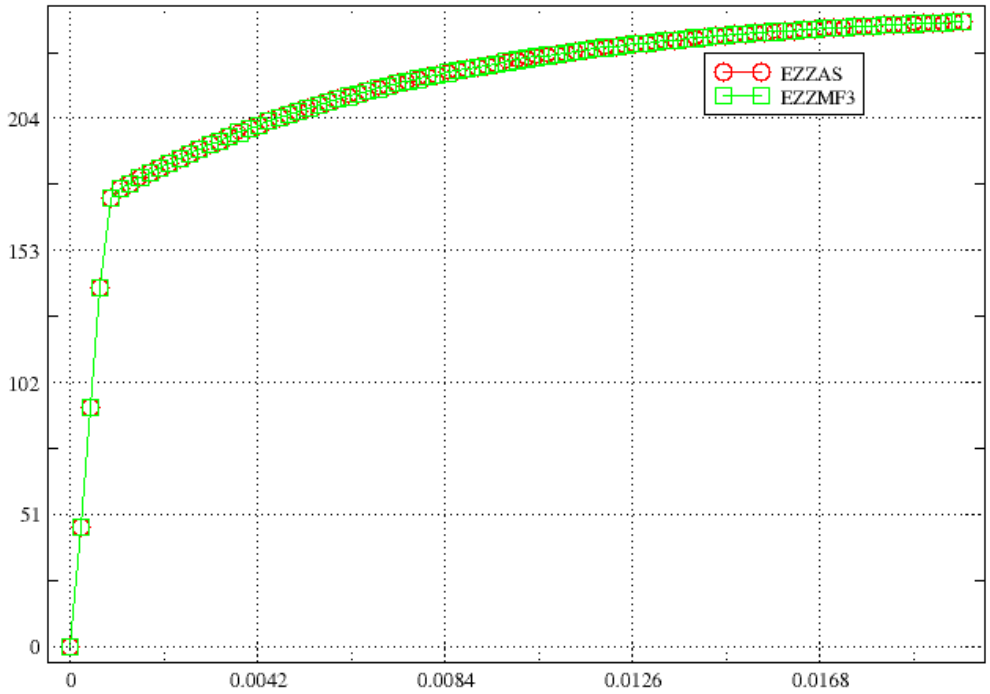
3.1 Caractéristiques de la modélisation

Point matériel. Comportement MONOCRISTALLIN. La loi testée est MonoCrystal_CFC.mfront

3.2 Grandeurs testées et résultats

On compare la solution obtenue avec le comportement MonoCrystal_CFC de Mfront et celle obtenue avec le comportement MONOCRISTAL de Code_Aster, en testant le maximum de la différence relative des composantes suivantes :

Composante	Instant(s)	Référence (différence)	Tolérance absolue
SIZZ	Écart maximum	0	1.E-6
Rho_1*beta**2	Écart maximum	0	1.E-5



Courbes contraintes SIZZ en fonction des déformations EPZZ pour MFRONT et CODE_ASTER pour le comportement MONOCRISTAL CFC.

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

4 Modélisation C

4.1 Caractéristiques de la modélisation

Nombre de nœuds : 552.
Modélisation 3D : 2269 éléments de volume tétraédriques : TETRA4.
Les familles de systèmes de glissement sont de type octaédrique. La structure contient 10 grains générés par une procédure en python qui se base sur des cellules de Voronoï. A chacun des grains correspond 3 angles d'Euler qui définissent les orientations des systèmes de glissement .

4.2 Grandeurs testées et résultats

Comparaison des résultats obtenus avec *Code_Aster* au dernier instant calculé.

Identification	Référence	Tolérance %
σ_{xx} de SIEF_ELGA	-16.112	0,01
ε_{xx} de EPSI_ELGA	-1,0250E-03	0,01
ε_{yy} de EPSI_ELGA	-9.3714E-04	0,01
ε_{yy} de EPSP_ELGA	-2 .7745E-04	0,01

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

5 Modélisation D

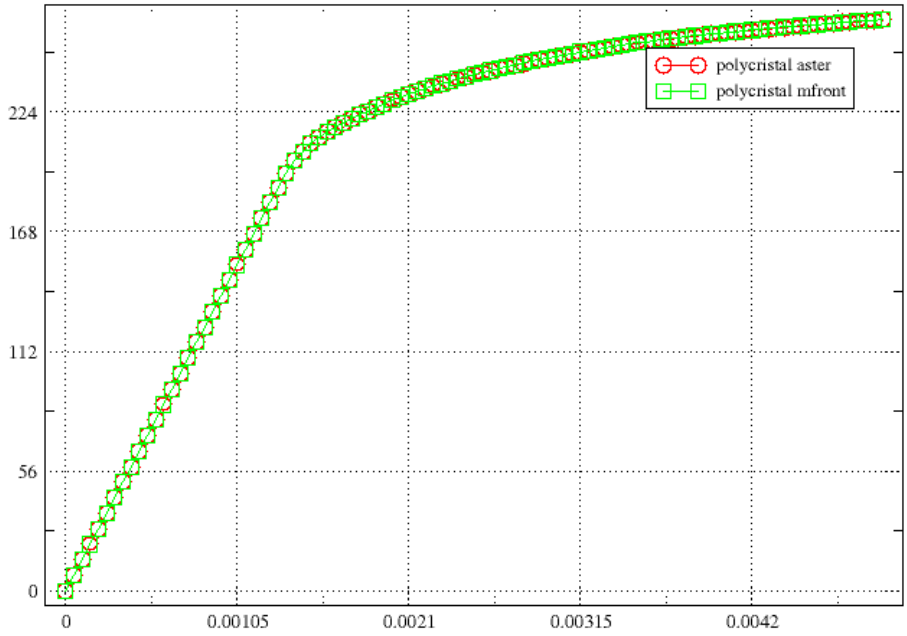
5.1 Caractéristiques de la modélisation

Comportement polycristallin homogénéisé. Sur point matériel. 30 grains d'orientations fixées.
La loi utilisée est PolyCrystal_MC.mfront

5.2 Grandeurs testées et résultats

On compare la solution obtenue avec le comportement Mfront et celle obtenue avec le comportement POLYCRISTAL, en testant le maximum de la différence relative des composantes suivantes :

Composante		Référence (différence)	Tolérance absolue
SIZZ	Somme des écarts	0	8,77



Courbes contraintes SIZZ en fonction des déformations EPZZ pour MFRONT et CODE_ASTER pour le comportement POLYCRISTAL MC.

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

6 Modélisation E

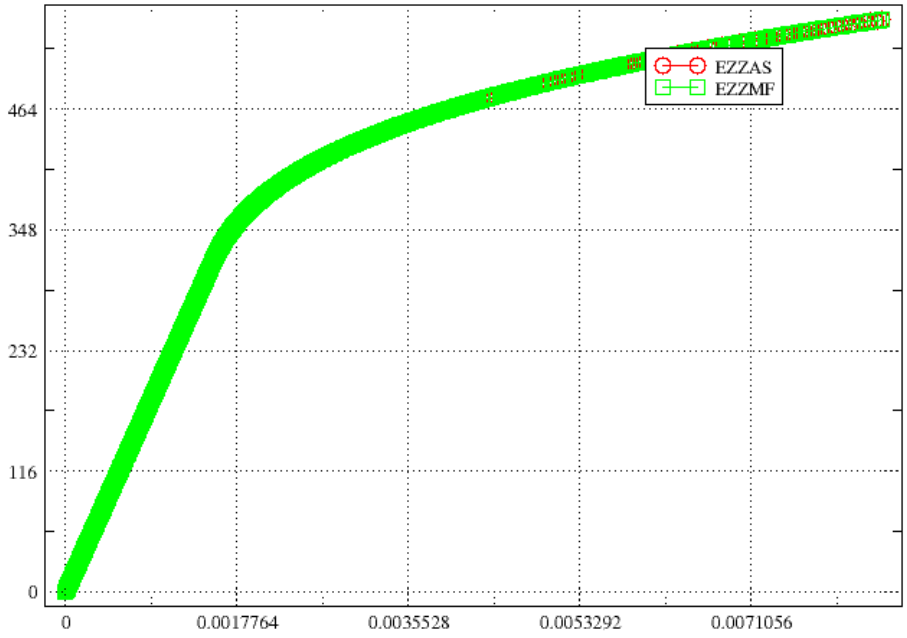
6.1 Caractéristiques de la modélisation

Comportement monocristallin DD_CFC. Point matériel. La loi utilisée est MonoCrystalDDCFC.mfront

6.2 Grandeurs testées et résultats

On compare la solution obtenue avec le comportement Mfront et celle obtenue avec le comportement MONOCRISTAL DD_CFC, en testant le maximum de la différence relative des composantes suivantes :

Composante	Instant(s)	Référence (différence)	Tolérance absolue
EPZZ	Écart maximum	0	1.E-4
Rho_1*beta**2	Écart maximum	0	1.E-4



Courbes contraintes SIZZ en fonction des déformations EPZZ pour MFRONT et CODE_ASTER pour le comportement MONOCRISTAL DD_CFC.

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

7 Modélisation F

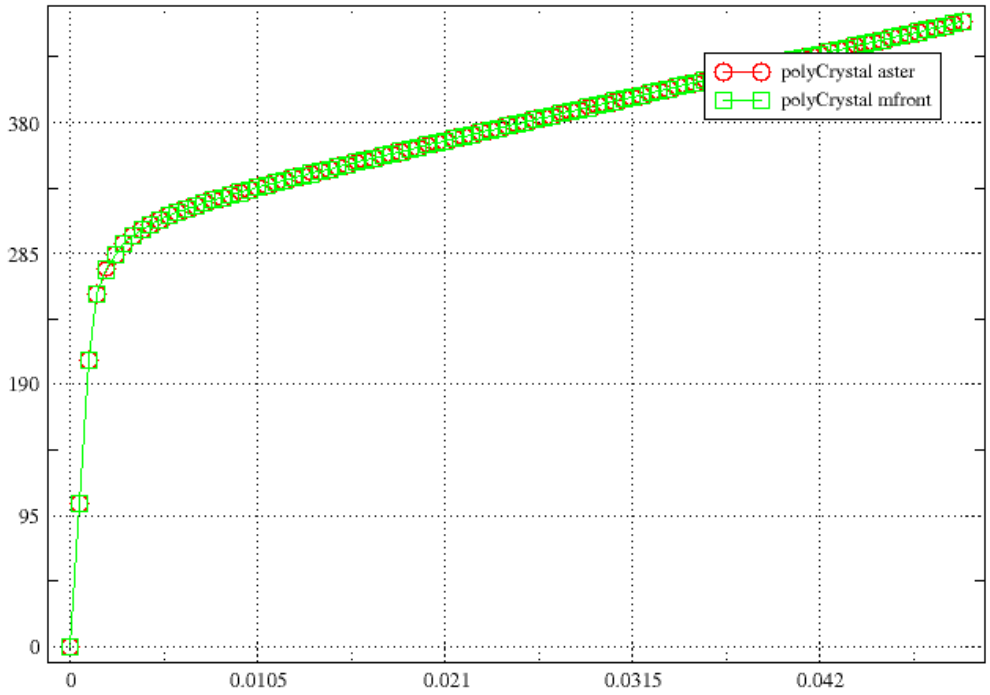
7.1 Caractéristiques de la modélisation

Comportement polycristallin homogénéisé DD_CFC. Point matériel. 30 grains d'orientations fixées.
La loi utilisée est PolyCrystalDDCFC.mfront

7.2 Grandeurs testées et résultats

On compare la solution obtenue avec le comportement Mfront et celle obtenue avec le comportement POLYCRISTAL de type DD_CFC, en testant le maximum de la différence des composantes suivantes :

Composante	Écart relatif	Référence (différence)	Tolérance absolue
SIZZ	Écart maximum	0	1.E-3



Courbes contraintes SIZZ en fonction des déformations EPZZ pour MFRONT et CODE_ASTER pour le comportement POLYCRISTAL DD_CFC.

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

8 Modélisation G

8.1 Caractéristiques de la modélisation

Comportement monocristallin DD_CFC_IRRA. Point matériel.
La loi utilisée est MonoDDCFC_Irra.mfront

8.2 Grandeurs testées et résultats

On compare la solution obtenue avec le comportement Mfront et celle obtenue avec le comportement MONO_DD_CFC_IRRA, en testant le maximum de la différence des composantes suivantes :

Composante	Instant(s)	Référence (différence)	Tolérance absolue
SIZZ	Écart maximum	0	1.E-8
Rho_1*beta**2	Écart maximum	0	1.E-8

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

9 Modélisation H

9.1 Caractéristiques de la modélisation

Point matériel. Cristal d'orientation (-1,4,9). Comportement monocristallin DD_CC.

La loi utilisée est MonoCrystalDDCC.mfront.

9.2 Grandeurs testées et résultats

On compare la solution obtenue avec le comportement Mfront et celle obtenue avec le comportement MONO_DD_CC en testant le maximum de la différence relative des composantes suivantes :

Composante	Instant(s)	Référence (différence)	Tolérance relative
rho_5	Ecart maximum	0	1.E-3

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

10 Modélisation I

10.1 Caractéristiques de la modélisation

Point matériel. Comportement monocristallin DD_CC_IRRA.

La loi utilisée est MonoDDCC_Irra.mfront

10.2 Grandeurs testées et résultats

On compare la solution obtenue avec le comportement Mfront et celle obtenue avec le comportement MONO_DD_CC_IRRA en testant le maximum de la différence relative des composantes suivantes :

Composante	Instant(s)	Référence (différence)	Tolérance relative
rho_8	Ecart maximum	0	1.E-3
rho_5	Ecart maximum	0	1.E-4

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

11 Modélisation J

11.1 Caractéristiques de la modélisation

Comportement monocristallin en grandes déformations. Les lois utilisées sont FiniteStrainSingleCrystal.mfront et FiniteStrainSingleCrystal_NumericalJacobian.mfront

Modélisation similaire au test SSND112A, mais avec un comportement MONO_VISC1.

11.2 Grandeurs testées et résultats

On compare la solution obtenue avec le comportement Mfront et celle obtenue avec le comportement MONOCRISTAL et DEFORMATION='SIMO_MIEHE'.

Composante	Instant(s)	Référence (aster)	Tolérance relative
ε_{zz}	0,1	0.1066652	0,001
σ_{zz}	0,1	278.978407	0,001
γ_1	0,1	0.18838793	0,003
γ_9	0,1	3.9782E-03	0,08
γ_{12}	0,1	6.184097E-03	0,02

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

12 Modélisation K

12.1 Caractéristiques de la modélisation

Point matériel. 30 grains d'orientations fixées. Comportement polycristallin homogénéisé DD_CC.
La loi utilisée est PolyCrystalDDCC.mfront

12.2 Grandeurs testées et résultats

On compare la solution obtenue avec le comportement Mfront et celle obtenue avec le comportement similaire POLYCRISTAL de type DD_CC, en testant le maximum de la différence relative des composantes suivantes :

Composante	Instant(s)	Référence (différence)	Tolérance
EPZZ	Ecart maximum	0	1.E-6
SIZZ	Ecart maximum	0	3.E-2

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

13 Synthèse des résultats

Les résultats sont satisfaisants et valident l'interface entre *Code_Aster* et MFRONT en 3D, pour des comportements avec des comportements cristallins.

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)