SSND112 – Rotation de réseau et grandes déformations sur un monocristal

Résumé :

On effectue, sur un problème réduit au point matériel, une traction sur un monocristal

Modélisation A : cette modélisation permet de valider le comportement MONOCRISTAL de type CFC .en grandes déformations

Modélisation B : cette modélisation permet de valider le comportement MONOCRISTAL de type CFC .en petites déformations avec prise en compte de la rotation du réseau cristallin

Modélisation C : cette modélisation utilise le comportement MONOCRISTAL de type CFC .en petites déformations pour comparaison qualitative avec les modélisations A et B.

Modélisation D : cette modélisation utilise le comportement MONOCRISTAL de type CC .en grandes déformations.

Modélisation E : cette modélisation permet de valider le comportement MONOCRISTAL de type CFC .en grandes déformations, de la même façon que la modélisation A, mais avec le comportement CFC_IRRA

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

1 Problème de référence

1.1 Géométrie

Il s'agit d'un point matériel, représentatif d'un état de contraintes et de déformations homogène.
Il peut être simulé par un élément de volume représenté par un seul élément fini.

1.2 Propriétés des matériaux

1.2.1 Coefficients relatifs à l'élasticité isotrope

$$E=173000 MPa\ ,\ \nu=0.3 \quad \mu=\frac{E}{2(1+\nu)}$$

1.2.2 Coefficients de la loi cristalline MONO_DD_CFC (modélisations A,B,C,E)

$A=0.13$
$B=0.005$
$Y=2.5\mathrm{E}-7\,mm\,(2.5\,Angström)$
$\tau_f=20.$
$n=50.$
$\dot{\gamma}_0=10^{-3}$
$\rho_{ref}=10^6\,mm^{-2}$

$\alpha=0.35$
$\beta=2.5410^{-7}\,(2.54\,Angström)$

La matrice d'interaction est celle définie pour MONO_DD_CFC [R5.03.11].
La famille de systèmes de glissement est octaédrique (CFC)

Les coefficients liés à l'irradiation (modélisation E) sont :
$\alpha^{loops}=0 \quad \phi^{loops}=0.001 \quad \alpha^{voids}=0 \quad \rho^{voids}=1.e3$
$\rho_{sat}=4\,\rho_0 b^2 \quad \Phi_{sat}=0.04 \quad \xi_{irra}=10^7 \quad \zeta_{irra}=10^7$ avec $\rho_0=10^6\,mm^{-2}$

Les variables internes représentant la densité de dislocations sont initialisées à $\rho_0 * b^2$
Celles qui sont liées à l'irradiation ont pour valeurs initiales : $\rho_s^{loops}=2\,\rho_0 b^2 \quad \Phi_s^{voids}=0.001$

1.2.3 Coefficients de la loi cristalline MONO_DD_CC (modélisation D)

$D_{LAT}=1.0\ ,$
$K_{BOLTZ}=8.62\mathrm{E}-05,$
$GAMMA0=1.\mathrm{E}-3, TAU_F=2.\mathrm{E}7,\ TAU_0=3.63,$
$RHO_{MOB}=1.\mathrm{E}11,$
$K_F=30.0\,, K_{SELF}=100.0,$
$B=2.48\mathrm{E}-10, DELTAG0=0.84\,, D=1.\mathrm{E}-08,$
$N=20.0\,, BETA=0.2\,,$
$GH=1.\mathrm{E}11\,, Y_{AT}=1.00\mathrm{E}-09,$

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

La matrice d'interaction est constuite à partir des valeurs suivantes
$H1=0.1024$, $H2=0.7$, $H3=0.1$, $H4=0.1$, $H5=0.1$ $H6=0.1$,

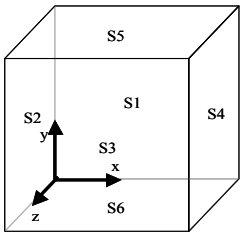
La famille de systèmes de glissement est cubique1 (CC).

Les variables internes représentant la densité de dislocations sont initialisées à $\rho_0=10^5 mm^{-2}$

La formulation utilisée ici est la formulation 1 (choisie à l'aide du paramètre DELTA1=0) (cf. [R5.03.11]

1.3 Conditions aux limites et chargements

L'élément de volume cubique de côté $1\mathrm{m}$ est soumis à un essai de traction simple homogène, en déformations imposées.1 HEXA8.



Le chargement imposé est le suivant :

- La face $S1$ est bloquée suivant la direction z
- La face $S3$ subit un déplacement de $0,2\,mm$ en $0.2\,s$ et en 100 incréments.
- les déplacements suivant X et Y du point origine sont nuls
- une raideur valant $1O^4 N/m$ suivant Y est ajoutée au point origine, via un élément discret, pour permettre une rotation quasi-libre autour de Z

1.4 Conditions initiales

Contraintes et déformations nulles. Densité de dislocations initiale : $\rho_0=10^6 mm^{-2}$

2 Solution de référence

Elle s'appuie sur [bib.1] et [v6.08.110]. Dans le domaine des petites déformations, le tenseur des contraintes $\boldsymbol{\sigma}$ étant uniaxial, on peut calculer pour chaque système de glissement, la scission résolue par : $\tau_s=\boldsymbol{\sigma}:\boldsymbol{\mu}_s$ avec $\boldsymbol{\mu}_s$ le tenseur d'orientation défini par : $(m_s)_{ij}=\frac{1}{2}((n_s)_i\cdot(l_s)_j+(l_s)_i\cdot(n_s)_j)$, $\mathbf{n}_s$ désignant la normale au plan de glissement du système s et $\mathbf{l}_s$ la direction de glissement. L'évolution du glissement plastique est donnée pour chaque système s par (cf. [R5.03.11]) :

Cas du CFC : Pour l'orientation choisie, soit 1-5-9, les facteurs de Schmid initiaux, reliant le tenseur des contraintes aux différentes scissions résolues τ_s sont, pour les 12 systèmes octaédriques :

$[0.45784855, 0.22892428, 0.22892428, 0.15261618, 0.26707832, 0.11446214,$
$0.19840104, 0.29760156, 0.4960026, 0.04578486, 0.11446214, 0.16024699]$

On constate donc que le premier système de glissement activé sera le numéro 9 ($A3$), et le deuxième sera le numéro 1 (soit $B4$).

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

En grandes déformations, ou en prenant en compte la rotation de réseau, on doit voir apparaître pour une déformation non infinitésimale un troisième système de glissement, $C1$ (12ème système dans Code_Aster) dont l'activité croît de façon importante, tandis que le glissement visco-plastique du système $A3$ n'évolue plus [2].

2.1 Références bibliographiques

[1] N.Rupin Note EDF-R&D : HT24-2010-01128-en « implementation of a new constitutive law based on dislocation dynamics for fcc materials».

[2] Simulation de la réponse mécanique d'un acier inoxydable austénitique à l'aide de calculs cristallins N. Rupin , J.M. Proix , F. Latourte , G. Monnet, communication au 10e Colloque National en Calcul des Structures, 9-13 Mai 2011, Presqu'île de Giens (Var).

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

3 Modélisation A

3.1 Caractéristiques de la modélisation

Le comportement est MONOCRISTAL, en grandes déformations (DEFORMATION='SIMO_MIEHE')

3.2 Grandeurs testées et résultats

3.2.1 Valeurs testées

Petites déformations, comparaison à la modélisation C.

Variable	Instants (s)	Référence	Tolérance
E_{zz} EPSG_ELGA	0,02	0.02023	0,001
σ_{zz} (Mpa) SIEF_ELGA	0,02	114.125	0,01
ρ_1 VARI_ELGA / V7)	0,02	9.8085E-07	0,005
γ_1 VARI_ELGA / V8)	0,02	0.0385	0,005
ρ_9 VARI_ELGA / V31)	0,02	1.0741E-07	0,13
γ_9 VARI_ELGA / V32)	0,02	1.04944E-03	0,33
test de non régression sur les deux dernières valeurs			
ρ_9 VARI_ELGA / V31)	0,02	9.30093E-08	0,001
γ_9 VARI_ELGA / V32)	0,02	7.0377E-04	0,001

Grandes déformations, comparaison à la modélisation B

Variable	Instants (s)	Référence	Tolérance
E_{zz} EPSG_ELGA	0,2	0.22385	0,002
σ_{zz} (Mpa) SIEF_ELGA	0,2	320.153	0,09
ρ_1 VARI_ELGA / V7)	0,2	1.731E-05	0,18
γ_1 VARI_ELGA / V8)	0,2	0.31346	0,06
ρ_9 VARI_ELGA / V31)	0,2	8.37E-07	0,06
γ_9 VARI_ELGA / V32)	0,2	0.010410	0,06
ρ_{12} VARI_ELGA / V40)	0,2	1.719E-05	0,24
γ_{12} VARI_ELGA / V41)	0,2	0.11118	0,21
test de non régression			
σ_{zz} (Mpa) SIEF_ELGA	0,2	293.247	0,001
ρ_1 VARI_ELGA / V7)	0,2	1.425E-05	0,001
γ_1 VARI_ELGA / V8)	0,2	0.297258	0,001
ρ_9 VARI_ELGA / V31)	0,2	7.87472E-07	0,001
γ_9 VARI_ELGA / V32)	0,2	9.79517E-03	0,001
ρ_{12} VARI_ELGA / V40)	0,2	1.309E-05	0,001
γ_{12} VARI_ELGA / V41)	0,2	0.088585	0,001

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

4 Modélisation B

4.1 Caractéristiques de la modélisation

Le comportement est MONOCRISTAL, en petites déformations (DEFORMATION='PETIT'), mais avec rotation de réseau cristallin (ROTA_RESEAU='CALC' dans DEFI_COMPOR).

4.2 Grandeurs testées et résultats

4.2.1 Valeurs testées

Petites déformations, comparaison à la modélisation C.

Variable	Instants (s)	Référence	Tolérance
E_{zz} EPSG_ELGA	0,02	0.02023	0,001
σ_{zz} (Mpa) SIEF_ELGA	0,02	114.125	0,011
ρ_1 VARI_ELGA / V7)	0,02	9.8085E-07	0,01
γ_1 VARI_ELGA / V8)	0,02	0.0385	0,012
ρ_9 VARI_ELGA / V31)	0,02	1.0741E-07	0,13
γ_9 VARI_ELGA / V32)	0,02	1.04944E-03	0,30
test de non régression sur les deux dernières valeurs			
ρ_9 VARI_ELGA / V31)	0,02	9.5373E-08	0,001
γ_9 VARI_ELGA / V32)	0,02	7.6027E-04	0,001

Grandes déformations, non régression

Variable	Instants (s)	Référence	Tolérance
E_{zz} EPSG_ELGA	0,2	0.22385	0,001
σ_{zz} (Mpa) SIEF_ELGA	0,2	320.153	0,001
ρ_1 VARI_ELGA / V7)	0,2	1.731E-05	0,001
γ_1 VARI_ELGA / V8)	0,2	0.31346	0,001
ρ_9 VARI_ELGA / V31)	0,2	8.37E-07	0,001
γ_9 VARI_ELGA / V32)	0,2	0.010410	0,001
ρ_{12} VARI_ELGA / V40)	0,2	1.719E-05	0,001
γ_{12} VARI_ELGA / V41)	0,2	0.11118	0,001

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

5 Modélisation C

5.1 Caractéristiques de la modélisation

Le comportement est MONOCRISTAL, en petites déformations (DEFORMATION='PETIT')

5.2 Grandeurs testées et résultats

5.2.1 Valeurs testées

Déformation imposée de 0.02, test de non régression.

Variable	Instants (s)	Référence	Tolérance
E_{zz} EPSG_ELGA	0,02	0.02023	0,001
σ_{zz} (Mpa) SIEF_ELGA	0,02	114.125	0,001
ρ_1 VARI_ELGA / V7)	0,02	9.8085E-07	0,001
γ_1 VARI_ELGA / V8)	0,02	0.0385	0,001
ρ_9 VARI_ELGA / V31)	0,02	1.0741E-07	0,001
γ_9 VARI_ELGA / V32)	0,02	1.04944E-03	0,001

Déformation imposée de 0.2, test de non régression.

Variable	Instants (s)	Référence	Tolérance
E_{zz} EPSG_ELGA	0,2	0.22444	0,001
σ_{zz} (Mpa) SIEF_ELGA	0,2	230,7133	0,001
ρ_1 VARI_ELGA / V7)	0,2	1.49E-05	0,001
γ_1 VARI_ELGA / V8)	0,2	0.3567	0,001
ρ_9 VARI_ELGA / V31)	0,2	6.30676E-06	0,001
γ_9 VARI_ELGA / V32)	0,2	0.05493	0,001
ρ_{12} VARI_ELGA / V40)	0,2	6.45160E-08 $=\rho_0$	0,001
γ_{12} VARI_ELGA / V41)	0,2	0	0,001

Cette modélisation comporte également deux calculs supplémentaires :

– le premier avec une matrice d'interaction fournie dans une table :

syst	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
1	0,124	0,124	0,124	0,625	0,137	0,137	0,137	0,122	0,070	0,137	0,070	0,122
2	0,124	0,124	0,124	0,137	0,070	0,122	0,625	0,137	0,137	0,137	0,122	0,070
3	0,124	0,124	0,124	0,137	0,122	0,070	0,137	0,070	0,122	0,625	0,137	0,137
4	0,625	0,137	0,137	0,124	0,124	0,124	0,122	0,137	0,070	0,122	0,070	0,137
5	0,137	0,070	0,122	0,124	0,124	0,124	0,070	0,137	0,122	0,137	0,137	0,625
6	0,137	0,122	0,070	0,124	0,124	0,124	0,137	0,625	0,137	0,070	0,122	0,137
7	0,137	0,625	0,137	0,122	0,070	0,137	0,124	0,124	0,124	0,122	0,137	0,070
8	0,122	0,137	0,070	0,137	0,137	0,625	0,124	0,124	0,124	0,070	0,137	0,122
9	0,070	0,137	0,122	0,070	0,122	0,137	0,124	0,124	0,124	0,137	0,625	0,137
10	0,137	0,137	0,625	0,122	0,137	0,070	0,122	0,070	0,137	0,124	0,124	0,124
11	0,070	0,122	0,137	0,070	0,137	0,122	0,137	0,137	0,625	0,124	0,124	0,124
12	0,122	0,070	0,137	0,137	0,625	0,137	0,070	0,122	0,137	0,124	0,124	0,124

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

- le second utilise de plus 12 systèmes de glissement donnés dans une table

syst	n1	n2	n3	m1	m2	m3
1	1,00	1,00	1,00	-1.00	0.00	1,00
2	1,00	1,00	1,00	0.00	-1.00	1,00
3	1,00	1,00	1,00	-1.00	1,00	0.00
4	1,00	-1.00	1,00	-1.00	0.00	1,00
5	1,00	-1.00	1,00	0.00	1,00	1,00
6	1,00	-1.00	1,00	1,00	1,00	0.00
7	-1.00	1,00	1,00	0.00	-1.00	1,00
8	-1.00	1,00	1,00	1,00	1,00	0.00
9	-1.00	1,00	1,00	1,00	0.00	1,00
10	-1.00	-1.00	1,00	-1.00	1,00	0.00
11	-1.00	-1.00	1,00	1,00	0.00	1,00
12	-1.00	-1.00	1,00	0.00	1,00	1,00

– les valeurs fournies pour la matrice d'interaction et les systèmes de glissement sont identiques aux valeurs de matrice d'interaction et des systèmes du comportement choisi (cf. [R5.03.11) On vérifie donc que les résultats sont les mêmes.

6 Modélisation D

6.1 Caractéristiques de la modélisation

Le comportement est MONOCRISTAL, l'écoulement visco-plastique est de type MONO_DD_CC, en grandes déformations (DEFORMATION='SIMO_MIEHE')

6.2 Grandeurs testées et résultats

6.2.1 Valeurs testées

Grandes déformations, non régression.

Le système de glissement principal est le numéro 5 ($D1$) et le secondaire est le 8 ($A6$)

Variable	Instants (s)	Référence (NON_REGRESSION)
E_{zz} EPSG_ELGA	4000	0,48759697170948
σ_{zz} (Mpa) SIEF_ELGA	4000	269,5583433288
ρ_5 VARI_ELGA / V19)	4000	4,719408788234E+07
γ_5 VARI_ELGA / V20)	4000	-0,42996601140607
ρ_8 VARI_ELGA / V28)	4000	3,847356282155E+07
γ_8 VARI_ELGA / V29)	4000	0,26136525944739

Pour tester l'événement RESI_MAXI, on fixe la valeur à 0,6 et on teste qu'on a bien deux itérations de Newton au premier instant.

7 Modélisation E

7.1 Caractéristiques de la modélisation

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

Le comportement est MONOCRISTAL, en grandes déformations (DEFORMATION='SIMO_MIEHE'), de façon similaire à la modélisation A, avec un comportement cristallin qui prend en compte l'irradiation

7.2 Grandeurs testées et résultats

7.2.1 Valeurs testées

Petites déformations, comparaison à la modélisation C.

Variable	Instants (s)	Référence	Tolérance
E_{zz} EPSG_ELGA	0,02	0.02023	0,001
σ_{zz} (Mpa) SIEF_ELGA	0,02	114.125	0,01
ρ_1 VARI_ELGA / V7)	0,02	9.8085E-07	0,005
γ_1 VARI_ELGA / V8)	0,02	0.0385	0,005
ρ_9 VARI_ELGA / V31)	0,02	1.0741E-07	0,13
γ_9 VARI_ELGA / V32)	0,02	1.04944E-03	0,33
test de non régression sur les deux dernières valeurs			
ρ_9 VARI_ELGA / V31)	0,02	9.30093E-08	0,001
γ_9 VARI_ELGA / V32)	0,02	7.0377E-04	0,001

Grandes déformations, comparaison à la modélisation B

Variable	Instants (s)	Référence	Tolérance
E_{zz} EPSG_ELGA	0,2	0.22385	0,002
σ_{zz} (Mpa) SIEF_ELGA	0,2	320.153	0,09
ρ_1 VARI_ELGA / V7)	0,2	1.731E-05	0,18
γ_1 VARI_ELGA / V8)	0,2	0.31346	0,06
ρ_9 VARI_ELGA / V31)	0,2	8.37E-07	0,06
γ_9 VARI_ELGA / V32)	0,2	0.010410	0,06
ρ_{12} VARI_ELGA / V40)	0,2	1.719E-05	0,24
γ_{12} VARI_ELGA / V41)	0,2	0.11118	0,21
test de non régression			
σ_{zz} (Mpa) SIEF_ELGA	0,2	293.247	0,001
ρ_1 VARI_ELGA / V7)	0,2	1.425E-05	0,001
γ_1 VARI_ELGA / V8)	0,2	0.297258	0,001
ρ_9 VARI_ELGA / V31)	0,2	7.87472E-07	0,001
γ_9 VARI_ELGA / V32)	0,2	9.79517E-03	0,001
ρ_{12} VARI_ELGA / V40)	0,2	1.309E-05	0,001
γ_{12} VARI_ELGA / V41)	0,2	0.088585	0,001

Les résultats sont identiques à ceux de la modélisation A, ce qui est le résultat attendu : les coefficients permettant de prendre en compte l'effet de l'irradiation dans l'écrouissage sont choisis nuls ici.

8 Synthèse des résultats

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

Les résultats sont satisfaisants et valident les grandes déformations du comportement MONOCRISTAL.

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