SSND110 – Validation des lois monocristallines issues de la Dynamique des Dislocations

Résumé :

On effectue, sur un problème réduit au point matériel, une validation des lois monocristallines, soit par rapport à une solution analytique, soit avec une référence expérimentale. Dans le premier cas (modélisations A et B et C), un mono-cristal est chargé suivant une orientation particulière, permettant le glissement privilégié d'un seul système, au moins au début du chargement. Dans le second cas (modélisation C), on se réfère à des résultats expérimentaux cités par Julien Schwartz dans sa thèse, ce qui conduit à simuler un essai de traction sur un polycristal constitué de 40 monocristaux dont le comportement est `MONO_DD_FAT`.

Modélisation A : cette modélisation permet de valider le comportement `MONO_DD_CFC` avec `SIMU_POINT_MAT`.
Modélisation B : cette modélisation permet de valider le comportement `MONO_DD_CC` avec `SIMU_POINT_MAT`.
Modélisation C : cette modélisation permet de valider le comportement `MONO_DD_FAT` avec `SIMU_POINT_MAT`.
Modélisation D : cette modélisation permet de valider le comportement `MONO_DD_CC_IRRA` avec `SIMU_POINT_MAT`.
Modélisation E : cette modélisation permet de valider le comportement `MONO_DD_CFC_IRRA` avec `SIMU_POINT_MAT`.

1 Problème de référence

1.1 Géométrie

Il s'agit d'un point matériel, représentatif d'un état de contraintes et de déformations homogène.

1.2 Propriétés des matériaux

1.2.1 Propriétés pour la modélisation A, loi cristalline MONO_DD_CFC

1.2.1.1 Coefficients relatifs à l'élasticité isotrope

Module de cisaillement: $\mu=80000.MPa$, Coefficient de Poisson $\nu=0.3$
Module d'Young: $E=\mu*2*(1.+\nu)$

1.2.1.2 Coefficients de la loi MONO_DD_CFC

$$A=0.13 \quad B=0.005 \quad \alpha=0.35 \quad \beta=2.5410^{-7}(2.54\,Angström)$$
$$Y=2.5 \quad 10^{-7}mm(2.5\,Angstrom) \quad \tau_f=20. \quad n=5. \quad \dot{\gamma}_0=10^{-3} \quad \rho_{ref}=10^6 mm^{-2}$$

La matrice d'interaction est composée uniquement de 1 : $H1=H2=H3=H4=H5=1.0$,
La famille de systèmes de glissement est octaédrique (CFC) .
Les variables internes représentant la densité de dislocations sont initialisées à ρ_0*b^2 avec $\rho_0=10^5 mm^{-2}$

1.2.2 Propriétés pour la modélisation B, loi cristalline MONO_DD_CC

1.2.2.1 Coefficients relatifs à l'élasticité isotrope

Coefficient de Poisson $\nu=0.35$
Module d'Young: $E=(236-0,0459\,T)$ GPa

1.2.2.2 Coefficients de la loi MONO_DD_CC

Deux jeux de coefficients sont utilisés suivant les cas :

Cas 1 (formulation 1)	Cas 2 (formulation 2)
$\mathrm{DELTA1}=0$ (formulation 1), $\mathrm{TEMP}=300\,K$ $\mathrm{D\_LAT}=1000\,\mathrm{mm}$ $\mathrm{K\_BOLTZ}=8.62\ 10^{-5}$ $\mathrm{GAMMA0}=10^{-3}s^{-1}$ $\mathrm{TAU\_0}=363\,\mathrm{MPa}$ $\mathrm{TAU\_F}=20\,\mathrm{MPa}$ $\mathrm{RHO\_MOB}=10^5\ \mathrm{mm}^{-2}$ $\mathrm{K\_F}=30$ $\mathrm{K\_SELF}=100$ $\mathrm{B}=2.48\ 10^{-7}\mathrm{mm}$ $\mathrm{N}=20$ $\mathrm{DELTAG0}=0.84$ $\mathrm{BETA}=0.2$ $\mathrm{D}=10^{-5}\mathrm{mm}$ $\mathrm{GH}=10^{11}$, $\mathrm{Y\_AT}=10^{-6}\mathrm{mm}$, Les variables internes représentant la densité de dislocations sont initialisées à $\rho_0=10^5 mm^{-2}$	$\mathrm{DELTA1}=1$ (formulation 2), $\mathrm{TEMP}=50\,K$ $\mathrm{D\_LAT}=1000\,\mathrm{mm}$ $\mathrm{K\_BOLTZ}=8.62\ 10^{-5}$ $\mathrm{GAMMA0}=10^{-6}s^{-1}$ $\mathrm{TAU\_0}=363\,\mathrm{MPa}$ $\mathrm{TAU\_F}=0$ $\mathrm{RHO\_MOB}=10^5\ \mathrm{mm}^{-2}$ $\mathrm{K\_F}=75$ $\mathrm{K\_SELF}=100$ $\mathrm{B}=2.48\ 10^{-7}\mathrm{mm}$ $\mathrm{N}=50$ $\mathrm{DELTAG0}=0.84$ $\mathrm{BETA}=0.2$ $\mathrm{D}=10^{-5}\mathrm{mm}$ $\mathrm{GH}=10^{11}$, $\mathrm{Y\_AT}=2\,10^{-6}\mathrm{mm}$, Les variables internes représentant la densité de dislocations sont initialisées à $\rho_0=10^5 mm^{-2}$, sauf pour le système principal (numéro 5) : $\rho_0=10^6 mm^{-2}$

La matrice d'interaction est construite dans les deux cas à partir des valeurs suivantes
$\mathrm{H1}=0.1024, \mathrm{H2}=0.7, \mathrm{H3=H4=H5=H6}=0.1$
La famille de systèmes de glissement est cubique (CC).

1.2.3 Propriétés pour la modélisation C

1.2.3.1 Coefficients relatifs à l'élasticité orthotrope

L'élasticité est ici orthotrope cubique, donc définie par 3 coefficients :

$$y_{1111}=244000.\ MPa$$
$$y_{1122}=96000.\ MPa$$
$$y_{1212}=74000.\ MPa$$

On a alors :

$$\nu_{\mathrm{LT}}=\nu_{TN}=\nu_{\mathrm{LN}}=\nu=\frac{1}{\left(1+\frac{y_{1111}}{y_{1122}}\right)}$$
$$E_L=E_T=E_N=y_{1111}\frac{(1-3\nu^2-2\nu^3)}{(1-\nu^2)}$$
$$G_{\mathrm{LT}}=G_{TN}=G_{\mathrm{LN}}=y_{1212}$$

1.2.3.2 Coefficients de la loi MONO_DD_FAT

$$\tau_f=44.9\ MPa$$
$$\dot{\gamma}_0=4.\ 10^{-11}\ s^{-1}$$
$$\beta=2.54 10^{-7}\ mm\ (2.54\ Angstr\ddot{o}m)$$
$$n=73.5$$
$$\mathrm{UN\_SUR\_D}=0.$$
$$g_{c0}=1.33\ 10^{-6}\ mm$$
$$K=37.14$$

La matrice d'interaction est caractérisée par les cinq coefficients suivants (cf [R5.03.11]):

$$H1=0.1236$$
$$H2=0.633$$
$$H3=0.1388$$
$$H4=0.1236$$
$$H5=0.0709$$

La famille de systèmes de glissement est octaédrique.

Les variables internes représentant la densité de dislocations sont initialisées à $\rho_0\times b^2$ avec $\rho_0=1.77 10^6\ mm^{-2}$

1.2.4 Propriétés pour la modélisation D, loi cristalline MONO_DD_CC_IRRA

1.2.4.1 Coefficients relatifs à l'élasticité isotrope

Coefficient de Poisson $\nu=0.35$
Module d'Young: $E=(236-0{,}0459\,T)$ GPa

1.2.4.2 Coefficients de la loi MONO_DD_CC_IRRA

$\mathrm{DELTA1}=0$ (formulation 1), $\mathrm{TEMP}=250\ K$
$\mathrm{D\_LAT}=1000\ \mathrm{mm}$ $\mathrm{K\_BOLTZ}=8.62\ 10^{-5}$

$\mathrm{GAMMA0}=10^{-3}s^{-1}$ $\mathrm{TAU\_0}=363\,\mathrm{MPa}$
$\mathrm{TAU\_F}=20\,\mathrm{MPa}$ $\mathrm{RHO\_MOB}=10^{5}\ \mathrm{mm}^{-2}$
$\mathrm{K\_F}=30$ $\mathrm{K\_SELF}=100$ $\mathrm{B}=2.48\ 10^{-7}\mathrm{mm}$
$\mathrm{N}=20$ $\mathrm{DELTAG0}=0.84$ $\mathrm{BETA}=0.2$
$\mathrm{D}=10^{-5}\mathrm{mm}$ $\mathrm{GH}=10^{11}$, $\mathrm{Y\_AT}=10^{-6}\mathrm{mm}$,
$\mathrm{A\_IRRA}=0.3$, $\mathrm{XI\_IRRA}=4.0$, $\mathrm{DELTA2}=0$
Les variables internes représentant la densité de dislocations sont initialisées à $\rho_0=10^5 mm^{-2}$

La matrice d'interaction est construite 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 cubique (CC).

1.2.5 Propriétés pour la modélisation E, loi cristalline MONO_DD_CFC_IRRA

1.2.5.1 Coefficients relatifs à l'élasticité isotrope

Module de cisaillement: $\mu=80000.MPa$, Coefficient de Poisson $\nu=0.3$
Module d'Young: $E=\mu*2*(1.+\nu)$

1.2.5.2 Coefficients de la loi MONO_DD_CFC

$A=0.13$ $B=0.005$ $\alpha=0.35$ $\beta=2.5410^{-7}(2.54\ Angström)$
$Y=2.5\ \ 10^{-7}mm(2.5\ Angstrom)$ $\tau_f=20.$ $n=5.$ $\dot{\gamma}_0=10^{-3}$ $\rho_{ref}=10^6 mm^{-2}$

$\alpha^{loops}=0{,}1$ $\varphi^{loops}=5.9\ \ 10^{-6}$ $\alpha^{voids}=0$ $\rho^{voids}=1.e3$
$\rho_{sat}=0$ $\varphi_{sat}=0.04$ $\xi_{irra}=10$ $\zeta_{irra}=10^7$ avec $\rho_0=10^5 mm^{-2}$

La matrice d'interaction est caractérisée par les cinq coefficients suivants (cf [R5.03.11]):
$H1=0.124$
$H2=0.625$
$H3=0.137$
$H4=0.122$
$H5=0.07$
,
La famille de systèmes de glissement est octaédrique (CFC) .
Les variables internes représentant la densité de dislocations sont initialisées à ρ_0*b^2
Celles qui sont liées à l'irradiation ont pour valeurs initiales : $\rho_s^{loops}=7.4\ \ 10^{-13}b^2$
$\phi_s^{voids}=0.001$

1.3 Conditions aux limites et chargements

1.3.1 Chargement pour les modélisations A, B (cas 1), et D

Le chargement est en contraintes imposées :

$$\sigma=\sigma_0\,\mathbf{n}\otimes\mathbf{n}$$

avec $\sigma_0=100\,MPa$ et $\mathbf{n}=(0.09667365, 0.48336824, 0.87006284)^T$

D'où les composantes du tenseur des contraintes imposé :

$\sigma_{xx}=0.93457943925233633$
$\sigma_{yy}=23.364485981308412$
$\sigma_{zz}=75.700934579439235$
$\sigma_{xy}=4.6728971962616823$
$\sigma_{xz}=8.411214953271027$
$\sigma_{yz}=42.056074766355138$

1.3.2 Chargement pour la modélisation B (cas 2)

Le chargement est en déformations imposées :

$dt\,\epsilon_{\text{zz imposée}}=3\,10^{-4}s^{-1}$ et $\varepsilon_{zz}(tmax)=0{,}27$ avec $tmax=900\,s$

Le monocristal a pour orientation [-1,4,9].

1.3.3 Chargement pour la modélisation C

Le chargement est en déformations imposées :

$\epsilon_{\text{zz imposée}}=0.001\,t$ de $t=0\,s$ à $t=45\,s$

1.3.4 Chargement pour la modélisation E

Le chargement est en déformations imposées :

$\epsilon_{\text{zz imposée}}=0.05\,t$ de $t=0\,s$ à $t=1\,s$

1.4 Conditions initiales

Contraintes et déformations nulles.

2 Solution de référence

2.1 Solution de référence pour la modélisation A

Elle s'appuie sur [bib.1] et [R5.03.11]. On trouve une solution analytique sous les hypothèses :

- le tenseur des contraintes $\boldsymbol{\sigma}$ est connu (contraintes imposées sur un point matériel)
- la matrice d'interaction a_{ij} est composée uniquement de 1.

Pour chaque système de glissement, la scission résolue se calcule par : $\tau_s=\boldsymbol{\sigma}:\mathbf{m_s}$

avec $\mathbf{m_s}$ 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 :

$\dot{\gamma}_s=\dot{p}_s\frac{\tau_s}{|\tau_s|}$ où $\dot{p}_s=\dot{\gamma}_0\left(\left(\frac{|\tau_s|}{\tau_f+\tau_s^{forest}}\right)^n-1\right)$ si $|\tau_s|\geq\tau_0+\tau_s^f$, sinon $\dot{p}_s=0$

avec $\tau_s^{forest}(\boldsymbol{\omega})=\mu\,C(\boldsymbol{\omega})\sqrt{\sum_{j=1,12}a_{sj}\langle\omega_j\rangle}$ où ω_s est relié à la densité de dislocation ρ_s par : : $\omega_s=b^2*\rho_s$. τ_s étant connu, $\dot{\gamma}_s$ est donc uniquement fonction de ω_s .

L'évolution de ω_s est donnée par l'équation différentielle : $\dot{\omega}_s=\dot{p}_s h_s(\langle\omega\rangle)$ avec

$$h_s(\omega)=\left(A\frac{\sum_{j\in forest(s)}\sqrt{a_{sj}}\langle\omega_j\rangle}{\sum_{j=1,12}\sqrt{a_{sj}\langle\omega_j\rangle}}+B\,C(\omega)\sum_{j\in copla(s)}\sqrt{a_{sj}\langle\omega_j\rangle}-\frac{y}{b}\langle\omega_s\rangle\right)$$

$$C(\omega)=0.2+0.8\frac{\ln\left(\alpha\sqrt{\sum_{i=1,12}\langle\omega_i\rangle}\right)}{\ln\left(\alpha b\sqrt{\rho_{ref}}\right)} .$$

Pour l'orientation choisie, soit $1\text{-}5\text{-}9$, les facteurs de Schmid, reliant le tenseur des contraintes aux différentes scissions résolues τ_s sont , pour les 12 systèmes octaédriques du CFC [R5.03.11] :

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

On constate donc que le premier système de glissement activé sera le numéro 9 ($\mathrm{A3}$), et le deuxième sera le numéro 1 (soit $\mathrm{B4}$). Les scissions résolues pour ces deux systèmes sont :

- système $\mathrm{A3}$ (numéro 9) : $\tau_s=49{,}6\,MPa$
- système $\mathrm{B4}$ (numéro 1) : $\tau_s=45{,}785\,MPa$

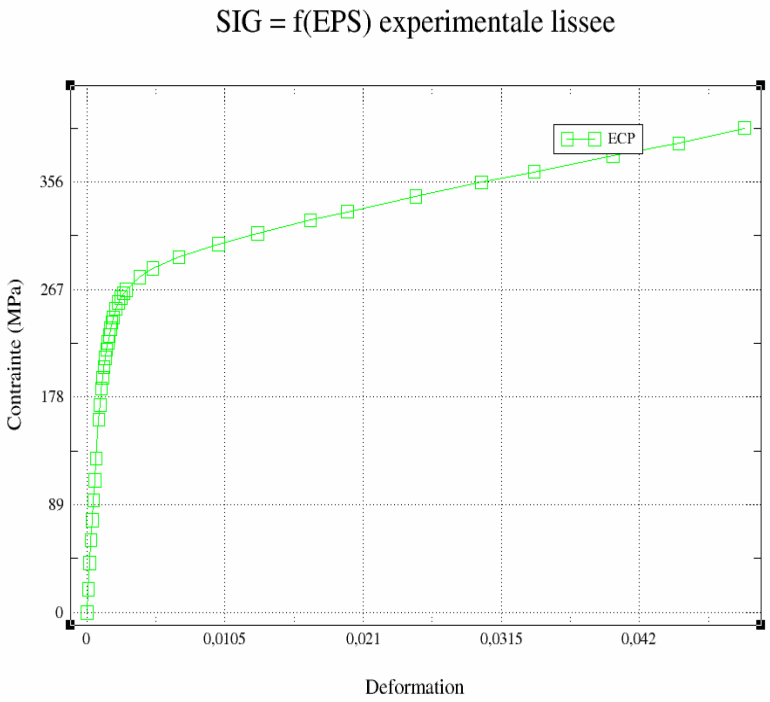
Pour ces deux systèmes, τ_s étant connu, il suffit de résoudre l'équation différentielle $\dot{\omega}_s=\dot{p}_s h_s(\langle\omega\rangle)$ pour connaître l'ensemble des variables. Ceci est effectué numériquement, à l'aide du module « odeint » de scipy (voir fichier `SSND110A.22`).

2.2 Solution de référence pour la modélisation B

Dans le cas du CC , pour l'orientation choisie, soit $1\text{-}5\text{-}9$, le premier système de glissement (famille CUBIQUE) activé sera le numéro 8, et le deuxième sera le numéro 5. Les scissions résolues pour ces deux systèmes sont :

- système numéro 8 : $\tau_s = 49{,}6\ Mpa$
- système numéro 5 : $\tau_s = 45{,}785\ MPa$

2.3 Solution de référence pour la modélisation C



Les données expérimentales sont résumées par la courbe lissée ci-dessous :
Pour plus de précision, on pourra se reporter à [2] et [3].

2.4 Solution de référence pour la modélisation D

La validation consiste à vérifier que les systèmes de glissement activés sont bien ceux qui sont attendus, et de comparer les résultats entre les intégrations explicite et implicite.

2.5 Solution de référence pour la modélisation E

La validation consiste à vérifier que la courbe contrainte-déformation obtenue avec irradiation présente bien un sur-écrouissage par rapport au cas non irradié, puis un adoucissement.

2.6 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] J.M. Stephan Note EDF-R&D : HT24-2010-01329-FR « Projet ANR AFGRAP – Courbes de traction monotones et cycliques moyennes de l'acier AISI 316LN (Tole T252) fourni par AREVA »

[3] J. Schwartz : «Approche non locale en plasticité cristalline : application à l'étude du comportement mécanique de l'acier AISI 316LN en fatigue oligocyclique». Thèse de l'Ecole Centrale de Paris, Juin 2011.

[4] G.Monnet : “Crystal plasticity constitutive law for irradiated RPV steel” Note EDF R&D H-T27-2011-02738-EN, Décembre 2011.

3 Modélisation A

3.1 Caractéristiques de la modélisation

Un point matériel de comportement DD_CFC, comportant 12 systèmes de glissement (famille OCTAEDRIQUE) est sollicité à contrainte imposée.

3.2 Grandeurs testées et résultats

3.2.1 Valeurs testées

Intégration RUNGE_KUTTA

Variable	Instants (s)	Référence
ρ_9	1	7.17405E-09
ρ_1	1	6.60769E-09
γ_9	1	8.003927E-05
γ_1	1	1.72109E-05
ε_{xx}^{vp}	1	-3.9702232E-05
ε_{xx}^{vp}	1	3.970223E-05
ε_{xx}^{vp}	1	1.8136978E-05
ε_{xx}^{vp}	1	2.807372E-05

Intégration IMPLICITE

Variable	Instants (s)	Référence
ρ_9	1	7.17405E-09
ρ_1	1	6.60769E-09
γ_9	1	8.003927E-05
γ_1	1	1.72109E-05
ε_{xx}^{vp}	1	-3.9702232E-05
ε_{xx}^{vp}	1	3.970223E-05
ε_{xx}^{vp}	1	1.8136978E-05
ε_{xx}^{vp}	1	2.807372E-05

4 Modélisation B

4.1 Caractéristiques de la modélisation

Un point matériel dont la loi d'écoulement monocristalline est MONO_DD_CC, comportant 12 systèmes de glissement de la famille CUBIQUE1, est sollicité à contrainte imposée.

4.2 Grandeurs testées et résultats

4.2.1 Valeurs testées

(cas 1)

Variable	Instants (s)	Référence
ρ_8	1	$1{,}036859\,10^{11}$
ρ_5	1	$1{,}01942\,10^{11}$
γ_8	1	$1{,}9427\,10^{-5}$
γ_5	1	$-1{,}01835\,10^{-5}$
ε_{xx}^{vp}	1	$-1{,}22\,10^{-5}$
ε_{zz}^{vp}	1	$1{,}21\,10^{-5}$
ε_{xx}^{vp}	1	$2{,}6871\,10^{-6}$
ε_{xx}^{vp}	1	$8{,}617\,10^{-6}$

(cas 2)

Variabl e	Instants (s)	Référence
ρ_5	100	$3{,}945\,10^{6}$
ρ_5	500	$9{,}087\,10^{6}$
γ_5	100	$-5.44\,10^{-2}$
γ_5	500	$-2.8714\,10^{-1}$

5 Modélisation C

5.1 Caractéristiques de la modélisation

Un point matériel dont la loi d'écoulement est celle d'un polycristal constitué de 40 monocristaux se comportant suivant la loi `MONO_DD_FAT`, comportant 12 systèmes de glissement (famille `OCTAEDRIQUE`), est sollicité en déformation imposée.

5.2 Grandeurs testées et résultats

5.2.1 Valeurs testées

Intégration `RUNGE_KUTTA`

Variable	Instants (s)	Référence	Aster	Tolérance
σ_{zz}	45	non_regression	424.9353 MPa	0.1%
σ_{zz}	45	source_externe	387.8 MPa	10.0%

6 Modélisation D

6.1 Caractéristiques de la modélisation

Un point matériel dont la loi d'écoulement monocristalline est MONO_DD_CC_IRRA, comportant 12 systèmes de glissement de la famille CUBIQUE1, est sollicité à contrainte imposée.

6.2 Grandeurs testées et résultats

6.2.1 Valeurs testées

Intégration RUNGE_KUTTA

Variable	Instants (s)	Référence
ρ_8	1	$1{,}00044\,10^{11}$
ρ_5	1	$1{,}0002\,10^{11}$
γ_8	1	$2.253361\,10^{-7}$
γ_5	1	$-1.0377\,10^{-7}$
ε_{xx}^{vp}	1	$-1.34842\,10^{-7}$
ε_{zz}^{vp}	1	$1.34505\,10^{-7}$
ε_{xy}^{vp}	1	$3.516926\,10^{-8}$
ε_{yz}^{vp}	1	$9.533983\,10^{-8}$

Intégration IMPLICITE

Comparaison à la solution de l'intégration **RUNGE_KUTTA**

Variable	Instants (s)	Référence	Tolérance %
ρ_8	1	$1{,}00044\,10^{11}$	0.5
ρ_5	1	$1{,}0002\,10^{11}$	0.1
γ_8	1	$2.253361\,10^{-7}$	0.1
γ_5	1	$-1.0377\,10^{-7}$	2
ε_{xx}^{vp}	1	$-1.34842\,10^{-7}$	0.1
ε_{zz}^{vp}	1	$1.34505\,10^{-7}$	2
ε_{xy}^{vp}	1	$3.516926\,10^{-8}$	2
ε_{yz}^{vp}	1	$9.533983\,10^{-8}$	2

7 Modélisation E

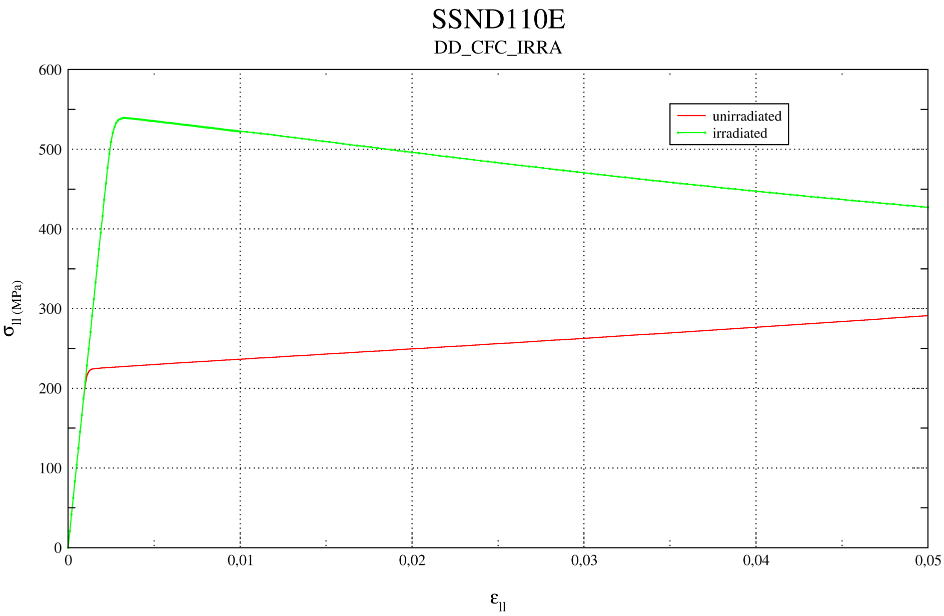
7.1 Caractéristiques de la modélisation

Modélisation identique à la modélisation A, hormis le comportement qui prend en compte l'irradiation.

7.2 Grandeurs testées et résultats

7.2.1 Valeurs testées

Variable	Instants (s)	Référence
σ_{zz}	6,6e-2	539,068
σ_{zz}	1	427,1665
ε_{xx}^{vp}	1	-0,045111
ε_{xx}^{vp}	1	0,047946
ε_{xx}^{vp}	1	0,01472
ε_{xx}^{vp}	1	-5,6913e-3



8 Synthèse des résultats

Les résultats sont satisfaisants et valident les comportements `DD_CFC, DD_CC et DD_FAT.`