

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 A : cette modélisation permet de valider le modèle élastique orthotrope par comparaison au test SSNV225C sur un point matériel.

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.

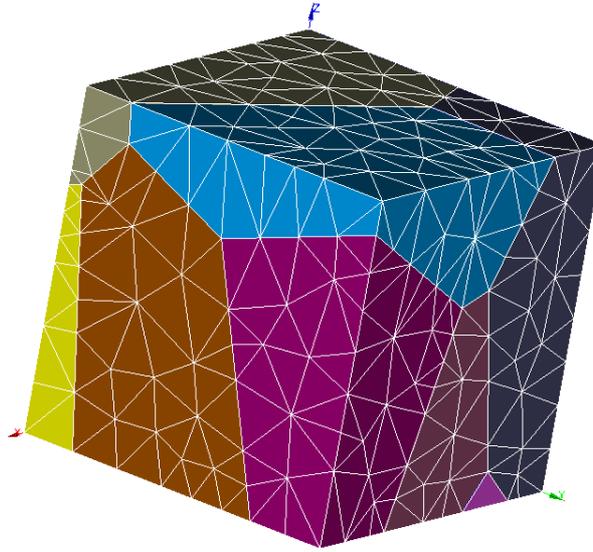
Modélisation K : cette modélisation permet de valider le modèle élasto-visco-plastique polycristallin homogénéisé de type DD_CC sur un point matériel avec 30 grains.

1 Problème de référence

1.1 Géométrie

La géométrie de la modélisation A est identique à celle du test SSLV113A.

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 A : élasticité orthotrope

Les coefficients du comportement Mfront sont, pour la modélisation A :

E_L	11000
E_T	5000
E_N	8000
NU_LT	0,396
NU_TN	0,11
NU_LN	0,15
G_LT	10500
G_TN	13000
G_LN	7000

Le fichier Mfront définissant le comportement élastique orthotrope est « elasorth.mfront ».

1.2.2 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 :

MonoCristal_CFC.mfront
MonoCristal_CFC_Newton.mfront

1.2.3 Modélisation C : monocristal sur un agrégat de 10 grains

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 :

MonoCristal.mfront
MonoCristal_CFC_SlidingSystems.mfront
MonoCristal_InteractionMatrix.mfront

1.2.4 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 :

```
PolyCristal_CFC.mfront  
PolyCristal_Orientation.mfront
```

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

1.2.5 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 :

```
MonoCristal_DD_CFC.mfront  
MonoCristal_DD_CFC_InteractionMatrix.mfront
```

1.2.6 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
G	80000

La densité de dislocation initiale vaut 1.E5. Les fichiers Mfront définissant le comportement sont :

PolyCristal_DD_CFC.mfront

MonoCristal_DD_CFC_InteractionMatrix.mfront

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

1.2.7 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 :
MonoCristal_DD_CFC_Irradiation.mfront
MonoCristal_DD_CFC_InteractionMatrix.mfront

1.2.8 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 :

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 :

```
MonoCristal_DD_CC.mfront  
MonoCristal_DD_CC_InteractionMatrix.mfront  
MonoCristal_DD_CC_SlidingSystems.mfront
```

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

1.2.9 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
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 :

```
MonoCristal_DD_CC_Irradiation.mfront  
MonoCristal_DD_CC_InteractionMatrix.mfront  
MonoCristal_DD_CC_SlidingSystems.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.

3 Modélisation A

3.1 Caractéristiques de la modélisation

Modélisation 3D, identique à SSLV131A. La loi testée est OrthotropicElastic.mfront

3.2 Grandeurs testées et résultats

Comparaison avec SSLV131A

Identification	Référence	Tolérance %
$DY(c)$	21	1.E-5
EPXY	3	1.E-5
EPXZ	4	1.E-5
EPYZ	6	1.E-5
SIXX	601.8754	1.E-5
SIYY	80053.665	1.E-5
SIZZ	78596.607	1.E-5
SIXY	83948.263	1.E-5
SIXZ	17339.093	1.E-5
SIYZ	126571.71	1.E-5

4 Modélisation B

4.1 Caractéristiques de la modélisation

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

4.2 Grandeurs testées et résultats

On compare la solution obtenue avec le comportement Mfront et celle obtenue avec le comportement MONOCRISTAL, 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

5 Modélisation C

5.1 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 .

5.2 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

6 Modélisation D

6.1 Caractéristiques de la modélisation

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

6.2 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 contrainte SIZZ en fonction des déformations EPZZ pour MFRONT et POLYCRISTAL.

7 Modélisation E

7.1 Caractéristiques de la modélisation

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

7.2 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
SIZZ	Écart maximum	0	1,E-4
Rho_1*beta**2	Écart maximum	0	1,E-4

8 Modélisation F

8.1 Caractéristiques de la modélisation

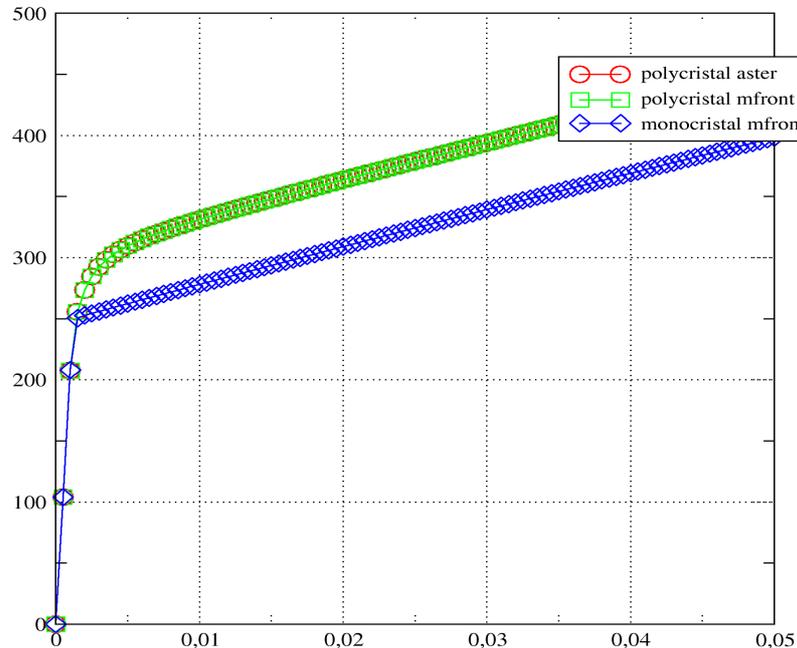
Point matériel. 30 grains d'orientations fixées. Comportement polycristallin homogénéisé DD_CFC. La loi utilisée est PolyCristal_DD_CFC.mfront

8.2 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 contrainte SIZZ en fonction des déformations EPZZ pour MFRONT et POLYCRISTAL.

9 Modélisation G

9.1 Caractéristiques de la modélisation

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

9.2 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

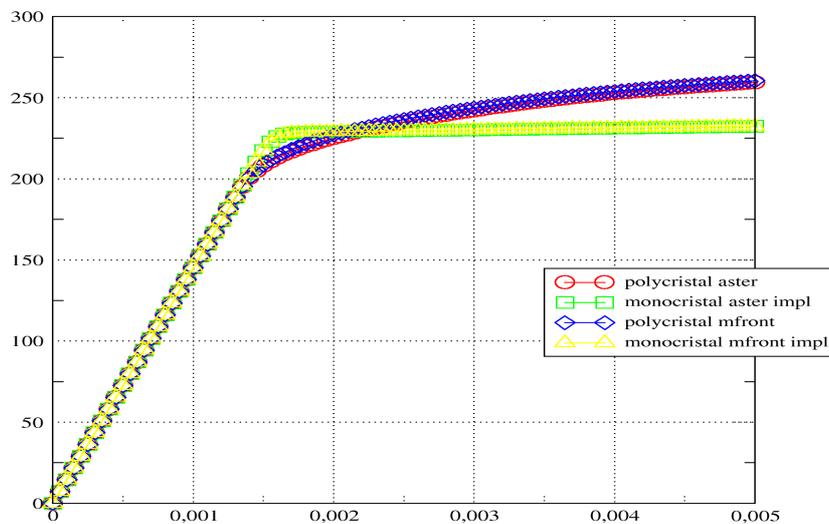
10 Modélisation H

10.1 Caractéristiques de la modélisation

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

La loi utilisée est MonoCristal_DD_CC.mfront.

Polycristal 100 grains alea



10.2 Grandeurs testées et résultats

On compare la solution obtenue avec le comportement Mfront et celle obtenue avec le comportement MONO_DD_CC du test SSND110B.

Composante	Instant(s)	Référence (différence)	Tolérance relative
rho_5	100	$3.944964 \cdot 10^6 \cdot b^2$	0,01
rho_5	500	$9.086727 \cdot 10^6 \cdot b^2$	0,01

11 Modélisation I

11.1 Caractéristiques de la modélisation

Point matériel. Comportement monocristallin DD_CC_IRRA.

La loi utilisée est MonoCristal_DD_CC_Irradiation.mfront

11.2 Grandeurs testées et résultats

On compare la solution obtenue avec le comportement Mfront et celle obtenue avec le comportement MONO_DD_CC_IRRA du test SSND110D.

Composante	Instant(s)	Référence (différence)	Tolérance relative
rho_8	1	$1,000465 \cdot 10^6 \cdot b^2$	0,0003
rho_5	1	$1,000214 \cdot 10^6 \cdot b^2$	0,0002

12 Modélisation J

12.1 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.

Les coefficients matériau 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 ;

12.2 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

13 Modélisation K

13.1 Caractéristiques de la modélisation

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

13.2 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, testé dans SSNV194D.

Composante	Déformation	Référence	Tolérance
SIZZ	0,04	790.51268	4,E-3

14 Synthèse des résultats

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