

## 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*

## 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

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

#### 1.2.2 Coefficients de la loi cristalline MONO\_DD\_CFC (modélisations A,B,C,E)

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

$$\begin{aligned} \alpha &= 0.35 \\ \beta &= 2.54 \cdot 10^{-7} (2.54 \text{ Angström}) \end{aligned}$$

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 :

$$\alpha^{loops} = 0 \quad \phi^{loops} = 0.001 \quad \alpha^{voids} = 0 \quad \rho^{voids} = 1.e3 \quad \text{avec} \quad \rho_0 = 10^6 \text{ mm}^{-2}$$
$$\rho_{sat} = 4 \rho_0 b^2 \quad \phi_{sat} = 0.04 \quad \xi_{irra} = 10^7 \quad \zeta_{irra} = 10^7$$

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)

$$\begin{aligned} D_{LAT} &= 1.0, \\ K_{BOLTZ} &= 8.62 \text{E} - 05, \\ GAMMA0 &= 1.E - 3, TAU_F = 2.E7, TAU_0 = 3.63, \\ RHO_{MOB} &= 1.E11, \\ K_F &= 30.0, K_{SELF} = 100.0, \\ B &= 2.48 \text{E} - 10, DELTAG0 = 0.84, D = 1.E - 08, \\ N &= 20.0, BETA = 0.2, \\ GH &= 1.E11, Y_{AT} = 1.00 \text{E} - 09, \end{aligned}$$

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

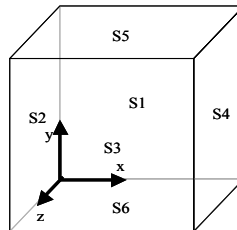
La famille de systèmes de glissement est cubique1 ( CC ).

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 1m 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  $10^4 N/m$  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  $\sigma$  étant uniaxial, on peut calculer pour chaque système de glissement, la scission résolue par :  $\tau_s = \sigma : \mu_s$  avec  $\mu_s$  le tenseur d'orientation défini par :

$$(m_s)_{ij} = \frac{1}{2}((n_s)_i \cdot (l_s)_j + (l_s)_i \cdot (n_s)_j), \quad \mathbf{n}_s \text{ désignant la normale au plan de glissement du système } s \text{ et}$$

$\mathbf{l}_s$  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  $\tau_s$  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  $B4$  ).

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, *CI* (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).

## 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     |
| $\sigma_{zz}$ ( Mpa ) SIEF_ELGA                       | 0,02         | 114.125     | 0,01      |
| $\rho_1$ VARI_ELGA / V7)                              | 0,02         | 9.8085E-07  | 0,005     |
| $\gamma_1$ VARI_ELGA / V8)                            | 0,02         | 0.0385      | 0,005     |
| $\rho_9$ VARI_ELGA / V31)                             | 0,02         | 1.0741E-07  | 0,13      |
| $\gamma_9$ VARI_ELGA / V32)                           | 0,02         | 1.04944E-03 | 0,33      |
| test de non régression sur les deux dernières valeurs |              |             |           |
| $\rho_9$ VARI_ELGA / V31)                             | 0,02         | 9.30093E-08 | 0,001     |
| $\gamma_9$ 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     |
| $\sigma_{zz}$ ( Mpa ) SIEF_ELGA | 0,2          | 320.153     | 0,09      |
| $\rho_1$ VARI_ELGA / V7)        | 0,2          | 1.731E-05   | 0,18      |
| $\gamma_1$ VARI_ELGA / V8)      | 0,2          | 0.31346     | 0,06      |
| $\rho_9$ VARI_ELGA / V31)       | 0,2          | 8.37E-07    | 0,06      |
| $\gamma_9$ VARI_ELGA / V32)     | 0,2          | 0.010410    | 0,06      |
| $\rho_{12}$ VARI_ELGA / V40)    | 0,2          | 1.719E-05   | 0,24      |
| $\gamma_{12}$ VARI_ELGA / V41)  | 0,2          | 0.11118     | 0,21      |
| test de non régression          |              |             |           |
| $\sigma_{zz}$ ( Mpa ) SIEF_ELGA | 0,2          | 293.247     | 0,001     |
| $\rho_1$ VARI_ELGA / V7)        | 0,2          | 1.425E-05   | 0,001     |
| $\gamma_1$ VARI_ELGA / V8)      | 0,2          | 0.297258    | 0,001     |
| $\rho_9$ VARI_ELGA / V31)       | 0,2          | 7.87472E-07 | 0,001     |
| $\gamma_9$ VARI_ELGA / V32)     | 0,2          | 9.79517E-03 | 0,001     |
| $\rho_{12}$ VARI_ELGA / V40)    | 0,2          | 1.309E-05   | 0,001     |
| $\gamma_{12}$ VARI_ELGA / V41)  | 0,2          | 0.088585    | 0,001     |

## 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                                              | Instant (s) | Référence   | Tolérance |
|-------------------------------------------------------|-------------|-------------|-----------|
| $E_{zz}$ EPSG_ELGA                                    | 0,02        | 0.02023     | 0,001     |
| $\sigma_{zz}$ (Mpa) SIEF_ELGA                         | 0,02        | 114.125     | 0,011     |
| $\rho_1$ VARI_ELGA / V7)                              | 0,02        | 9.8085E-07  | 0,01      |
| $\gamma_1$ VARI_ELGA / V8)                            | 0,02        | 0.0385      | 0,012     |
| $\rho_9$ VARI_ELGA / V31)                             | 0,02        | 1.0741E-07  | 0,13      |
| $\gamma_9$ VARI_ELGA / V32)                           | 0,02        | 1.04944E-03 | 0,30      |
| test de non régression sur les deux dernières valeurs |             |             |           |
| $\rho_9$ VARI_ELGA / V31)                             | 0,02        | 9.5373E-08  | 0,001     |
| $\gamma_9$ VARI_ELGA / V32)                           | 0,02        | 7.6027E-04  | 0,001     |

Grandes déformations, non régression

| Variable                       | Instant (s) | Référence | Tolérance |
|--------------------------------|-------------|-----------|-----------|
| $E_{zz}$ EPSG_ELGA             | 0,2         | 0.22385   | 0,001     |
| $\sigma_{zz}$ (Mpa) SIEF_ELGA  | 0,2         | 320.153   | 0,001     |
| $\rho_1$ VARI_ELGA / V7)       | 0,2         | 1.731E-05 | 0,001     |
| $\gamma_1$ VARI_ELGA / V8)     | 0,2         | 0.31346   | 0,001     |
| $\rho_9$ VARI_ELGA / V31)      | 0,2         | 8.37E-07  | 0,001     |
| $\gamma_9$ VARI_ELGA / V32)    | 0,2         | 0.010410  | 0,001     |
| $\rho_{12}$ VARI_ELGA / V40)   | 0,2         | 1.719E-05 | 0,001     |
| $\gamma_{12}$ VARI_ELGA / V41) | 0,2         | 0.11118   | 0,001     |

## 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     |
| $\sigma_{zz}$ ( Mpa ) SIEF_ELGA | 0,02         | 114.125     | 0,001     |
| $\rho_1$ VARI_ELGA / V7)        | 0,02         | 9.8085E-07  | 0,001     |
| $\gamma_1$ VARI_ELGA / V8)      | 0,02         | 0.0385      | 0,001     |
| $\rho_9$ VARI_ELGA / V31)       | 0,02         | 1.0741E-07  | 0,001     |
| $\gamma_9$ 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     |
| $\sigma_{zz}$ ( Mpa ) SIEF_ELGA | 0,2          | 230,7133                  | 0,001     |
| $\rho_1$ VARI_ELGA / V7)        | 0,2          | 1.49E-05                  | 0,001     |
| $\gamma_1$ VARI_ELGA / V8)      | 0,2          | 0.3567                    | 0,001     |
| $\rho_9$ VARI_ELGA / V31)       | 0,2          | 6.30676E-06               | 0,001     |
| $\gamma_9$ VARI_ELGA / V32)     | 0,2          | 0.05493                   | 0,001     |
| $\rho_{12}$ VARI_ELGA / V40)    | 0,2          | 6.45160E-08<br>= $\rho_0$ | 0,001     |
| $\gamma_{12}$ 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 |

- 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 ( *DI* ) et le secondaire est le 8 ( *A6* )

| Variable                        | Instants ( s ) | Référence<br>(NON_REGRESSION) |
|---------------------------------|----------------|-------------------------------|
| $E_{zz}$ EPSG_ELGA              | 4000           | 0,48759697170948              |
| $\sigma_{zz}$ ( Mpa ) SIEF_ELGA | 4000           | 269,5583433288                |
| $\rho_5$ VARI_ELGA / V19)       | 4000           | 4,719408788234E+07            |
| $\gamma_5$ VARI_ELGA / V20)     | 4000           | -0,42996601140607             |
| $\rho_8$ VARI_ELGA / V28)       | 4000           | 3,847356282155E+07            |
| $\gamma_8$ 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

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     |
| $\sigma_{zz}$ ( Mpa ) SIEF_ELGA                       | 0,02         | 114.125     | 0,01      |
| $\rho_1$ VARI_ELGA / V7)                              | 0,02         | 9.8085E-07  | 0,005     |
| $\gamma_1$ VARI_ELGA / V8)                            | 0,02         | 0.0385      | 0,005     |
| $\rho_9$ VARI_ELGA / V31)                             | 0,02         | 1.0741E-07  | 0,13      |
| $\gamma_9$ VARI_ELGA / V32)                           | 0,02         | 1.04944E-03 | 0,33      |
| test de non régression sur les deux dernières valeurs |              |             |           |
| $\rho_9$ VARI_ELGA / V31)                             | 0,02         | 9.30093E-08 | 0,001     |
| $\gamma_9$ 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     |
| $\sigma_{zz}$ ( Mpa ) SIEF_ELGA | 0,2          | 320.153     | 0,09      |
| $\rho_1$ VARI_ELGA / V7)        | 0,2          | 1.731E-05   | 0,18      |
| $\gamma_1$ VARI_ELGA / V8)      | 0,2          | 0.31346     | 0,06      |
| $\rho_9$ VARI_ELGA / V31)       | 0,2          | 8.37E-07    | 0,06      |
| $\gamma_9$ VARI_ELGA / V32)     | 0,2          | 0.010410    | 0,06      |
| $\rho_{12}$ VARI_ELGA / V40)    | 0,2          | 1.719E-05   | 0,24      |
| $\gamma_{12}$ VARI_ELGA / V41)  | 0,2          | 0.11118     | 0,21      |
| test de non régression          |              |             |           |
| $\sigma_{zz}$ ( Mpa ) SIEF_ELGA | 0,2          | 293.247     | 0,001     |
| $\rho_1$ VARI_ELGA / V7)        | 0,2          | 1.425E-05   | 0,001     |
| $\gamma_1$ VARI_ELGA / V8)      | 0,2          | 0.297258    | 0,001     |
| $\rho_9$ VARI_ELGA / V31)       | 0,2          | 7.87472E-07 | 0,001     |
| $\gamma_9$ VARI_ELGA / V32)     | 0,2          | 9.79517E-03 | 0,001     |
| $\rho_{12}$ VARI_ELGA / V40)    | 0,2          | 1.309E-05   | 0,001     |
| $\gamma_{12}$ 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

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