

---

## 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.

Pour toutes les modélisations (sauf C), on teste mono-cristal chargé suivant une orientation particulière, permettant le glissement privilégié d'un seul système, au moins au début du chargement.

Pour la 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

Modélisation B : cette modélisation permet de valider le comportement MONO\_DD\_CC

Modélisation C : cette modélisation permet de valider le comportement MONO\_DD\_FAT

Modélisation D : cette modélisation permet de valider le comportement MONO\_DD\_CC\_IRRA

Modélisation E : cette modélisation permet de valider le comportement MONO\_DD\_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.

### 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:  $\mu = 80000 \text{ MPa}$  , 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

$A = 0.13$   $B = 0.005$   $\alpha = 0.35$   $\beta = 2.54 \cdot 10^{-7}$  (2.54 Angström)

$Y = 2.5 \cdot 10^{-7} \text{ mm}$  (2.5 Angstrom)  $\tau_f = 20$ .  $n = 5$ .  $\dot{\gamma}_0 = 10^{-3}$

$\rho_{ref} = \rho_{tot} = 1.2 \cdot 10^6 \text{ mm}^{-2}$  est la densité totale initiale, servant à calculer la matrice d'interaction corrigée, dont les coefficients évoluent avec la densité de dislocation totale.

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 ) .

Chaque variable interne représentant la densité de dislocation d'un système de glissement est initialisées à  $\rho_0 * b^2$  avec  $\rho_0 = 10^5 \text{ mm}^{-2} = \frac{\rho_{tot}}{12}$

#### 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:  $E = (236 - 0,0459 T) \text{ GPa}$

##### 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)
<p>DELTA1=0 (formulation 1), TEMP=300 K D_LAT=1000 mm K_BOLTZ=8.62 10<sup>-5</sup> GAMMA0=10<sup>-3</sup> s<sup>-1</sup> TAU_0=363 MPa TAU_F=20 MPa RHO_MOB=10<sup>5</sup> mm<sup>-2</sup> K_F=30 K_SELF=100 B=2.48 10<sup>-7</sup> mm N=20 DELTAG0=0.84 BETA=0.2 D=10<sup>-5</sup> mm GH=10<sup>11</sup> , Y_AT=10<sup>-6</sup> mm ,</p> <p>Les variables internes représentant la densité de dislocations sont initialisées à <math>\rho_0 = 10^5 \text{ mm}^{-2}</math></p>	<p>DELTA1=1 (formulation 2), TEMP=50 K D_LAT=1000 mm K_BOLTZ=8.62 10<sup>-5</sup> GAMMA0=10<sup>-6</sup> s<sup>-1</sup> TAU_0=363 MPa TAU_F=0 RHO_MOB=10<sup>5</sup> mm<sup>-2</sup> K_F=75 K_SELF=100 B=2.48 10<sup>-7</sup> mm N=50 DELTAG0=0.84 BETA=0.2 D=10<sup>-5</sup> mm GH=10<sup>11</sup> , Y_AT=2 10<sup>-6</sup> mm ,</p> <p>Les variables internes représentant la densité de dislocations sont initialisées à <math>\rho_0 = 10^5 \text{ mm}^{-2}</math>, sauf pour le système principal (numéro 5) : <math>\rho_0 = 10^6 \text{ mm}^{-2}</math></p>

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

$$y_{1111} = 244000. \text{ MPa}$$

$$y_{1122} = 96000. \text{ MPa}$$

$$y_{1212} = 74000. \text{ MPa}$$

On a alors :

$$\nu_{LT} = \nu_{TN} = \nu_{LN} = \nu = \frac{1}{\left(1 + \frac{y_{1111}}{y_{1122}}\right)}$$

$$E_L = E_T = E_N = y_{1111} \frac{(1 - 3\nu^2 - 2\nu^3)}{(1 - \nu^2)}$$

$$G_{LT} = G_{TN} = G_{LN} = y_{1212}$$

Remarque : le coefficient  $\mu^{loca}$  utilisé pour la localisation vaut 74000 Mpa.

### 1.2.3.2 Coefficients de la loi MONO\_DD\_FAT

$$\tau_f = 44.9 \text{ MPa}$$

$$\dot{\gamma}_0 = 4. 10^{-11} \text{ s}^{-1}$$

$$\beta = 2.5410^{-7} \text{ mm} \text{ (2.54 Angström)}$$

$$n = 73.5$$

$$UN\_SUR\_D = 0.$$

$$g_{c0} = 1.33 10^{-6} \text{ mm}$$

$$K = 37.14$$

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  
 $\rho_0 = 1.77 10^6 \text{ mm}^{-2}$

## 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

TEMP=250 K  
D\_LAT=1000 mm K\_BOLTZ=8.62 10<sup>-5</sup>  
GAMMA0=10<sup>-3</sup> s<sup>-1</sup> TAU\_0=363 MPa  
TAU\_F=20 MPa  
K\_F=30 K\_SELF=100 B=2.48 10<sup>-7</sup> mm  
N=20 DELTAG0=0.84  
D=10<sup>-5</sup> mm GH=10<sup>11</sup>, Y\_AT=10<sup>-6</sup> mm,  
A\_IRRA=0.3, XI\_IRRA=4.0,

Les variables internes représentant la densité de dislocations sont initialisées à  $\rho_0 = 10^5 \text{ mm}^{-2} = \frac{\rho_{tot}}{12}$  avec  $\rho_{tot} = 1,2 \cdot 10^6 \text{ mm}^{-2}$

RHO\_MOB =  $\rho_0$  est a densité mobile par système de glissement.

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:  $\mu = 80000 \text{ MPa}$ , 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  $\alpha = 0.35$   $\beta = 2.54 \cdot 10^{-7}$  (2.54 Angström)  
Y=2.5 10<sup>-7</sup> mm (2.5 Angstrom)  $\tau_f = 20$ . n=5.  $\gamma_0 = 10^{-3}$   $\rho_{ref} = 10^5 \text{ mm}^{-2}$   
 $\alpha^{loops} = 0,1$   $\varphi^{loops} = 5.9 \cdot 10^{-6}$   $\alpha^{voids} = 0$   $\rho^{voids} = 1.e3$  avec  $\rho_0 = \frac{10^5}{12} \text{ mm}^{-2}$   
 $\rho_{sat} = 0$   $\varphi_{sat} = 0.04$   $\xi_{irra} = 10$   $\zeta_{irra} = 10^7$

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  $\rho_0 * b^2$

Celles qui sont liées à l'irradiation ont pour valeurs initiales :  $\rho_s^{loops} = 7.4 \cdot 10^{-13} b^2$

$\phi_s^{voids} = 0.001$

## 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  $\sigma_0 = 100 \text{ MPa}$  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 :

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

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

### 1.3.3 Chargement pour la modélisation C

Le chargement est en déformations imposées :

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

### 1.3.4 Chargement pour la modélisation E

Le chargement est en déformations imposées :

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

## 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  $\sigma$  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 :  $\tau_s = \sigma : \mathbf{m}_s$

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 :

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

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

L'évolution de  $\omega_s$  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 1-5-9, les facteurs de Schmid, reliant le tenseur des contraintes aux différentes scissions résolues  $\tau_s$  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 (A3), et le deuxième sera le numéro 1 (soit B4). Les scissions résolues pour ces deux systèmes sont :

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

Pour ces deux systèmes,  $\tau_s$  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).

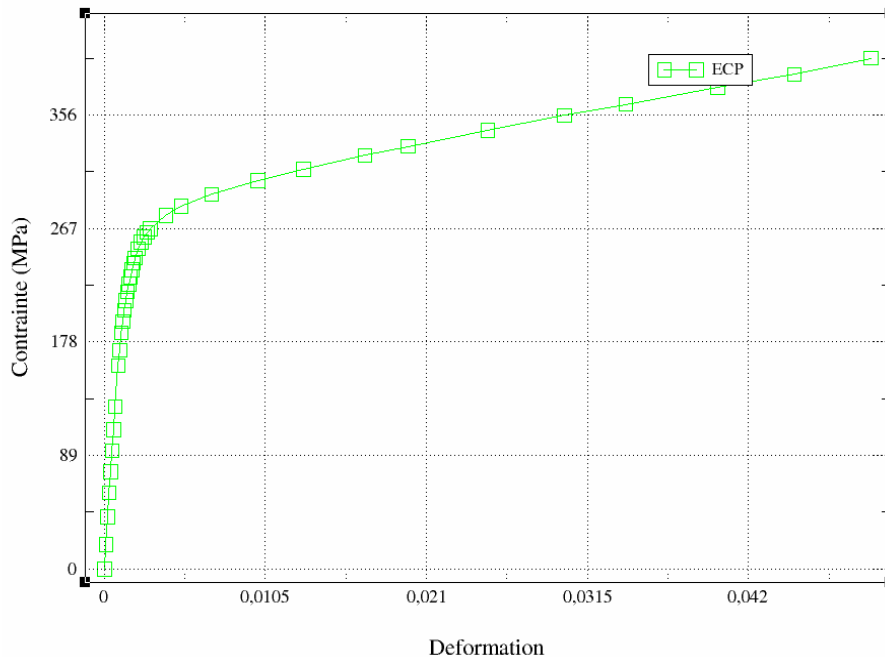
### 2.2 Solution de référence pour la modélisation B

Dans le cas du CC, pour l'orientation choisie, soit 1-5-9, 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 (à une température de 300K) :

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

## 2.3 Solution de référence pour la modélisation C

SIG = f(EPS) experimentale lisee



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

Variabl e	Instants (s)	Référence	Tolérance %
$\rho_9$	1	7.17E-09	0,1
$\rho_1$	1	6.608E-09	0,1
$\gamma_9$	1	8.00E-05	0,1
$\gamma_1$	1	1.72E-05	0,2
$\varepsilon_{xx}^{vp}$	1	-3.97E-05	0,1
$\varepsilon_{xx}^{vp}$	1	3.97E-05	0,1
$\varepsilon_{xx}^{vp}$	1	1.81E-05	0,1
$\varepsilon_{xx}^{vp}$	1	2.81E-05	0,1

Intégration IMPLICITE

Variabl e	Instants (s)	Référence	Tolérance %
$\rho_9$	1	7.17E-09	0,5
$\rho_1$	1	6.608E-09	0,1
$\gamma_9$	1	8.00E-05	1
$\gamma_1$	1	1.72E-05	2
$\varepsilon_{xx}^{vp}$	1	-3.97E-05	1
$\varepsilon_{xx}^{vp}$	1	3.97E-05	1
$\varepsilon_{xx}^{vp}$	1	1.81E-05	1
$\varepsilon_{xx}^{vp}$	1	2.81E-05	1

## 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

Température 300K

Variable	Instants (s)	Référence
$\tau_8$	1	$4,96 10^7$
$\tau_5$	1	$-4,57810^7$
$\rho_8$	1	$1,0215210^{11}$
$\rho_5$	1	$1,0113910^{11}$
$\gamma_8$	1	$2,1173 10^{-5}$
$\gamma_5$	1	$-1,1092710^{-5}$
$\epsilon_{xx}^{vp}$	1	$-1,3283 10^{-5}$
$\epsilon_{zz}^{vp}$	1	$1,3216 10^{-5}$
$\epsilon_{xy}^{vp}$	1	$2,9309 10^{-6}$
$\epsilon_{yz}^{vp}$	1	$9,3901 10^{-6}$

Température 50K

Variable	Instants (s)	Référence
$\rho_5$	100	$3,945 10^6$
$\rho_5$	500	$9,087 10^6$
$\gamma_5$	100	$-5.44 10^{-2}$
$\gamma_5$	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
$\sigma_{zz}$	45	non_regression	407.71 MPa	0.1%
$\sigma_{zz}$	45	source_externe	387.8 MPa	6.0%

## 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
$\rho_8$	1	1.0003807E+11
$\rho_5$	1	1.0001773E+11
$\gamma_8$	1	2.470697430610E-07
$\gamma_5$	1	-1.139016265372E-07
$\varepsilon_{xx}^{vp}$	1	-1.479102030578E-07
$\varepsilon_{zz}^{vp}$	1	1.475432149480E-07
$\varepsilon_{xy}^{vp}$	1	3.852669669294E-08
$\varepsilon_{yz}^{vp}$	1	1.045760539705E-07

Intégration `IMPLICITE`

(comparaison à l'intégration explicite)

Variabl e	Instants (s)	Référence	Tolérance %
$\rho_8$	1	1.0003807E+11	0,5
$\rho_5$	1	1.0001773E+11	0,5
$\gamma_8$	1	2.470697430610E-07	2
$\gamma_5$	1	-1.139016265372E-07	2
$\varepsilon_{xx}^{vp}$	1	-1.479102030578E-07	5
$\varepsilon_{zz}^{vp}$	1	1.475432149480E-07	2
$\varepsilon_{xy}^{vp}$	1	3.852669669294E-08	2
$\varepsilon_{yz}^{vp}$	1	1.045760539705E-07	2

Remarque : les écarts sont dus à la discrétisation en temps, plus grossière avec l'intégration implicite.

## 7 Modélisation E

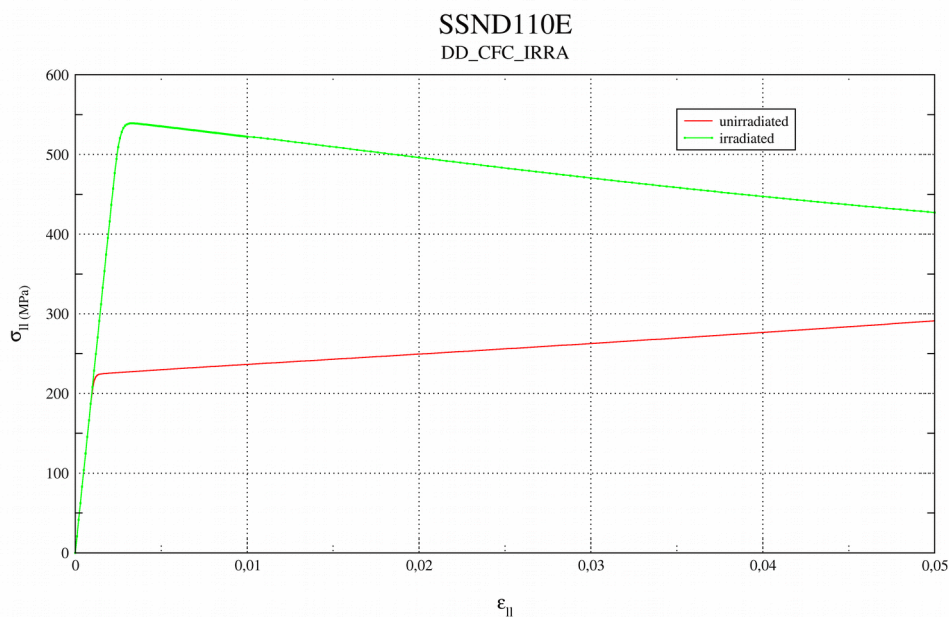
### 7.1 Caractéristiques de la modélisation

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

Variabl e	Instants (s)	Référence	Tolérance %
$\sigma_{zz}$	6,6e-2	539,068	0,2
$\sigma_{zz}$	1	427,1665	2
$\epsilon_{xx}^{vp}$	1	-0,045111	0,1
$\epsilon_{xx}^{vp}$	1	0,047946	0,1
$\epsilon_{xx}^{vp}$	1	0,01472	0,3
$\epsilon_{xx}^{vp}$	1	-5,6913e-3	0,1



## 8 Synthèse des résultats

Les résultats sont satisfaisants et valident les comportements DD\_CFC, DD\_CC et DD\_FAT.