



DMN/SRMA



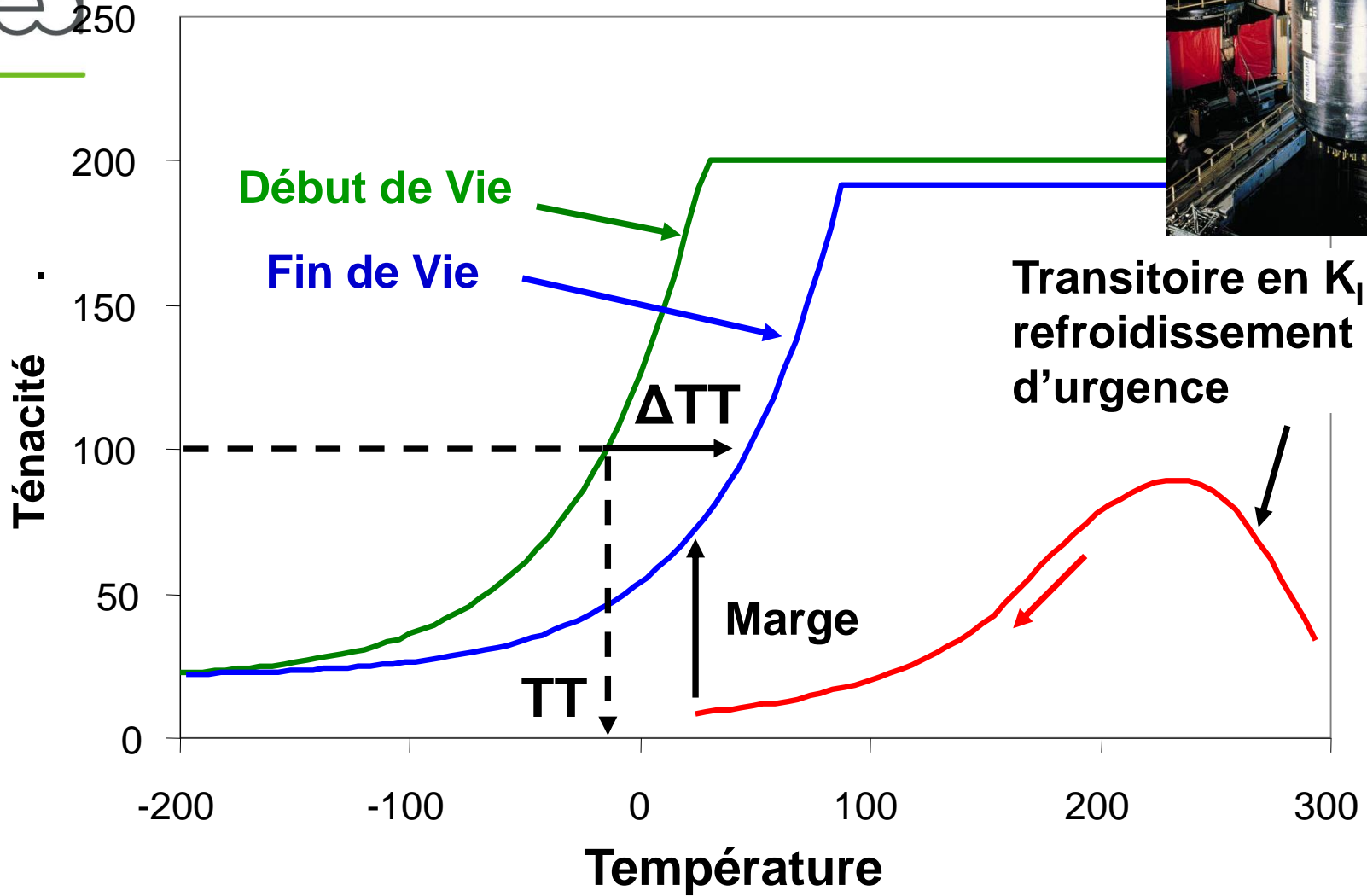
Comportement plastique cristallin et hétérogénéités de déformation dans les polycristaux

L. Vincent^a, L. Gélébart^a, R. Dakhlaoui^b, B. Marini^a

^a CEA Saclay, DEN, SRMA, 91191 Gif sur Yvette cedex

^b Grande Armée Conseil, 13 rue de Londres, 75009 Paris

Introduction - Contexte

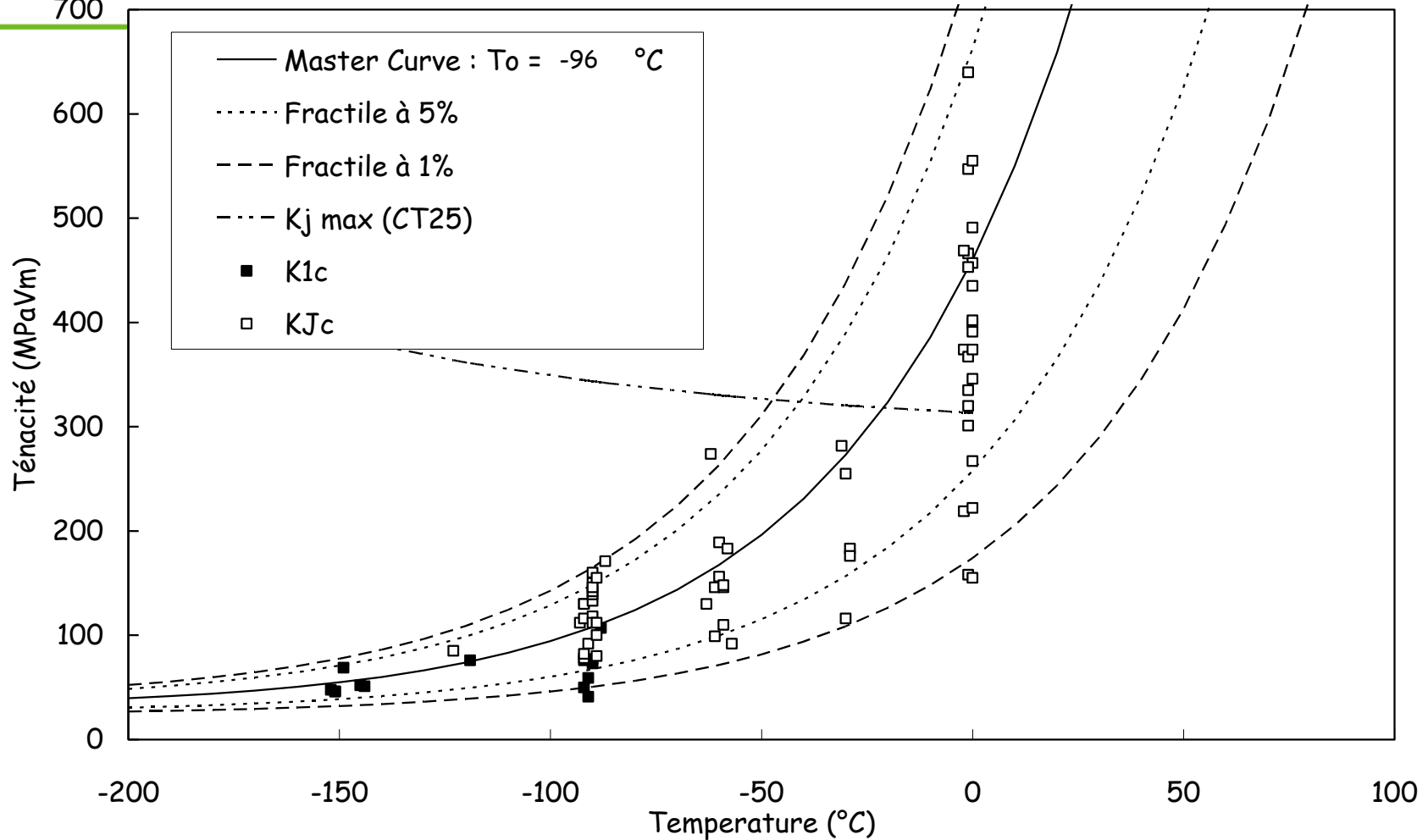


Transitoire en K₁ dû au refroidissement d'urgence

Introduction - Contexte



700



Critère de rupture fragile

$$\sigma_f = \sqrt{\lambda \cdot \frac{E \cdot \gamma_f}{r}}$$



Dispersion due à la Microstructure

Distribution de la taille des carbures

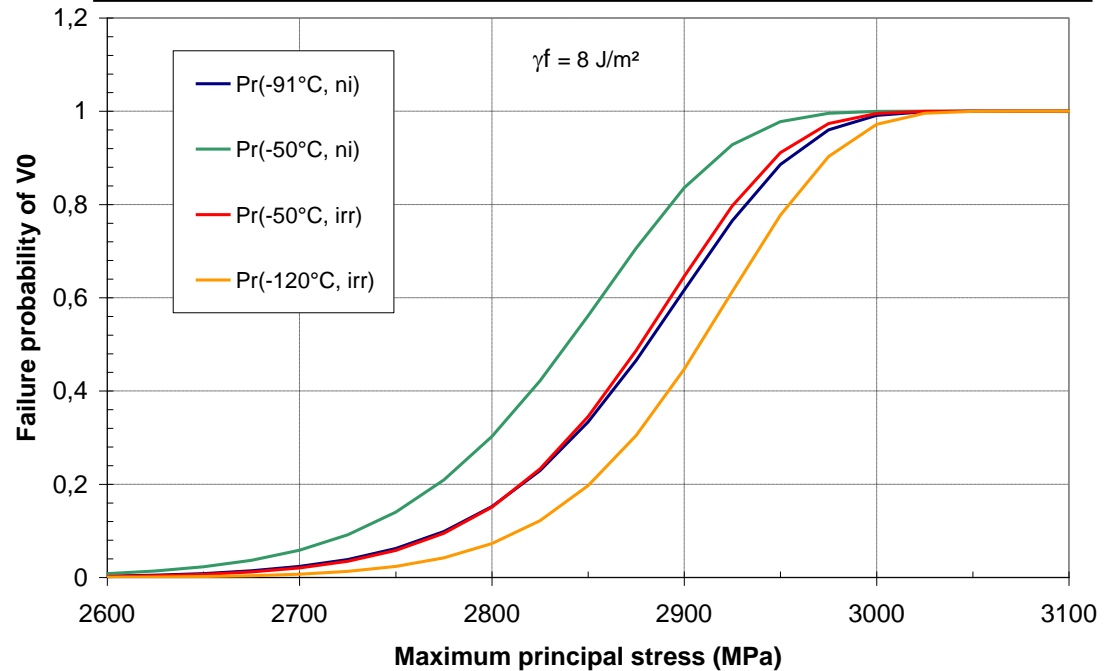
Distribution de valeurs extrêmes de contrainte principale maximale

$$F(r) = \exp\left(-\left(\frac{r}{\beta_r}\right)^{-\alpha_r}\right)$$

$$P(\sigma^* < \sigma_I) = \exp\left(-\exp\left(-\left(\frac{\sigma_I - \langle \sigma_I \rangle}{\alpha_1 \langle \sigma_{Mises} \rangle + \beta_1} + \gamma_1\right)\right)\right)$$

$$P_f(V_{el}) = \int_0^{+\infty} \frac{dF(r)}{dr} P(\sigma_I > \sigma_f(r)) dr$$

[Libert, 2007]





DMN/SRMA



PLAN

- Introduction – Contexte
- Localisation de la contrainte :
 - . Expérimentale
 - . Polycristalline
 - . Éléments finis
- Loi de Comportement
- Résultats – Analyse
- Conclusion - Perspectives



DMN/SRMA



PLAN

Introduction – Contexte

Localisation de la contrainte :

. Expérimentale

. Polycristalline

. Éléments finis

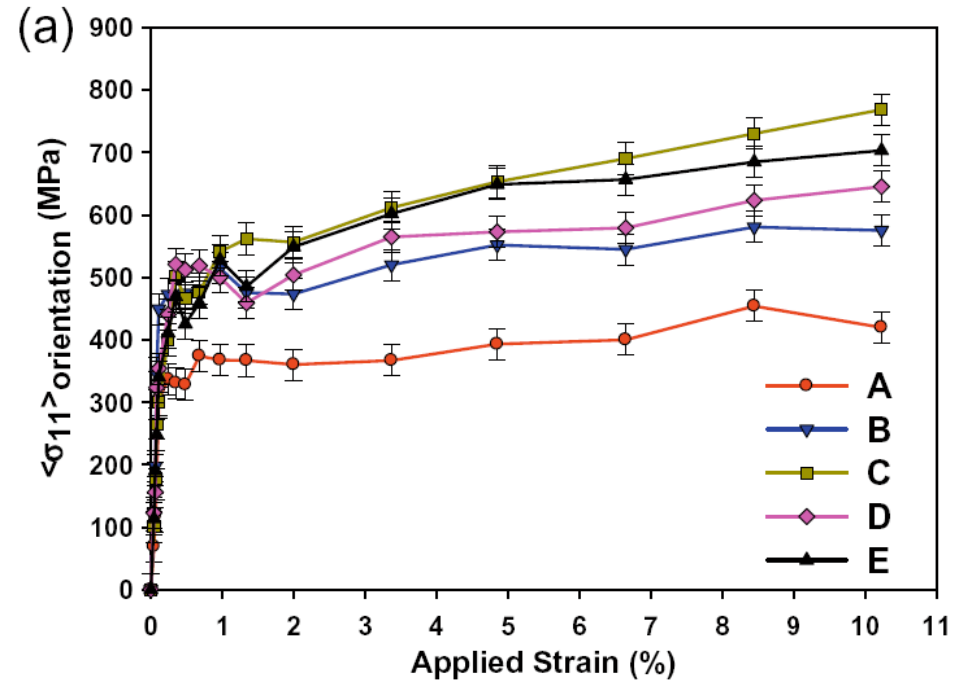
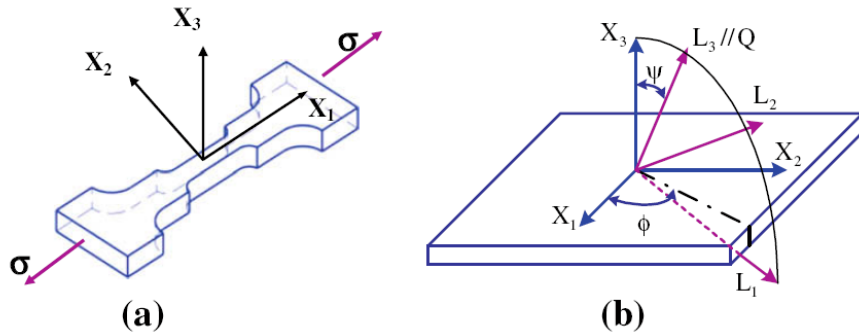
Loi de Comportement

Résultats – Analyse

Conclusion - Perspectives

Mesures par Diffraction des Neutrons

[Dakhlaoui et al., 2010]



Orientations correspondant à $\{X3\}\langle X1 \rangle$

A : $\{001\}\langle 100 \rangle$ Plan de clivage perpendiculaire à la direction de traction, $f_{schmid_{max}}=0,47$

B : $\{110\}\langle 1-11 \rangle$ syst de glissement $\{110\}\langle 111 \rangle$ dans la direction de traction $f_{s_{max}}<0,32$

C : $\{11-2\}\langle 111 \rangle$ syst de glissement $\{112\}\langle 111 \rangle$ dans la direction de traction $f_{s_{max}}<0,32$

D : $\{-110\}\langle 112 \rangle$ plans de glissement $\{110\},\{112\}$ colinéaire et perpendiculaire à la direction de traction

E : $\{111\}\langle -211 \rangle$ syst de glissement $\{112\}\langle 111 \rangle$ perpendiculaire à la direction de traction $f_{s_{max}}=0,4$



DMN/SRMA



Localisation du champ de contrainte

Objectif : Obtenir la distribution du champ de contrainte local fonction de :

~~La phase~~

L'orientation cristalline du grain de la phase

De la texture du matériau

Du comportement mécanique du matériau

Du voisinage (via EF seulement)

Plusieurs échelles d'hétérogénéité :

Contraintes d'ordre 0 : Σ_{Macro}	Diffraction de Neutrons
Contraintes d'ordre 1 : $\langle \sigma \rangle_{Ferrite}$, $\langle \sigma \rangle_{Cementite}$	Modélisation Polycristalline
Contraintes d'ordre 2 : $\langle \sigma \rangle_{\langle ijk \rangle [hkl]}$	à champ moyen
Contraintes d'ordre 3 : Hétérogénéité de $\sigma_{\langle ijk \rangle [hkl]}$	Simulation aux Elements Finis



DMN/SRMA



PLAN

- Introduction – Contexte
- Localisation de la contrainte :
 - . Expérimentale
 - . Polycristalline
 - . Éléments finis
- Loi de Comportement**
- Résultats – Analyse
- Conclusion - Perspectives



DMN/SRMA

Loi de comportement cristalline

Développée dans le cadre de la thèse ECP/CEA de M. Libert [Libert, 2007].

Loi d'écoulement [Louchet et al., 1979] :

$$\dot{\gamma}^s = \dot{\gamma}_0 \exp\left[-\frac{\Delta G(\tau_{eff}^s)}{k_B T}\right] \quad \text{avec}$$

$$\Delta G(\tau_{eff}^s) = \Delta G_0 \left[1 - \left(\frac{\tau_{eff}^s}{\tau_R}\right)^p\right]^q$$



Loi d'écrouissage [Rauch, 1993] :

$$\tau^s = \tau_0 + \tau_{eff}^s + \tau_{\mu}^s$$

τ_{eff}^s : contrainte effective
 τ_{μ}^s : contrainte athermique

$$\tau_{\mu}^s = \frac{(\mu b)^2 \sum a^{su} \rho^u}{\tau^s - \tau_0}$$

Loi d'évolution de ρ^s [Essman & Mughrabi, Mecking 1979, & Kocks 1981, Estrin & Mecking 1983]:

$$\dot{\rho}^s = \frac{|\dot{\gamma}^s|}{b} \left(\frac{1}{A^s} - g_c(T) \rho^s \right) \quad \text{avec}$$

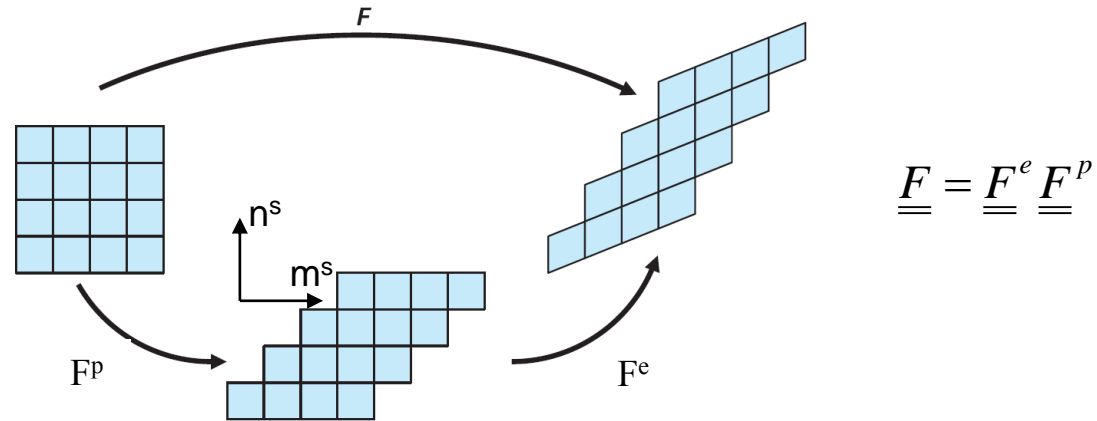
$$\frac{1}{A^s} = \underbrace{\frac{1}{D_{latte}}}_{\text{taille de latte}} + \underbrace{\frac{\sum_{u \neq s} \sqrt{\rho^u}}{K(T)}}_{\text{Interactions entre dislocations}}$$

⇒ Evolution $g_c(T)$:

$$g_c(T) = g_{c0} \exp\left[-\frac{E_{gc}}{k_B T}\right]$$

Loi de comportement cristalline

Implantation numérique implicite en grandes transformations



Configuration isocline relachée [Mandel, 1973]

Premier et second principe de la thermodynamique :

Loi d'état : $\underline{\underline{S}} = \underline{\underline{C}}^e : \underline{\underline{E}}^e$ avec

$$\underline{\underline{S}} = J \underline{\underline{F}}^{e^{-1}} \underline{\underline{\sigma}} \underline{\underline{F}}^{e^{-T}} = \frac{\rho_0}{\rho} \underline{\underline{F}}^{e^{-1}} \underline{\underline{\sigma}} \underline{\underline{F}}^{e^{-T}}$$

$$\underline{\underline{E}}^e = \frac{1}{2} \left(\underline{\underline{F}}^{eT} \underline{\underline{F}}^e - \underline{\underline{I}} \right)$$

Lois d'évolution pour γ^s et ρ^s vues p. précédente avec

$$\underline{\underline{\tau}}^s = \underline{\underline{\Sigma}} : \underline{\underline{N}}^s = \left(\underline{\underline{F}}^{eT} \underline{\underline{F}}^e \underline{\underline{C}}^e \underline{\underline{E}}^e \right) : \left(\underline{\underline{m}}^s \otimes \underline{\underline{n}}^s \right)$$

[Cailletaud, 2008] :



DMN/SRMA



Loi de comportement cristalline

Implantation numérique implicite. Variables $\underline{\underline{E}}^e, \Delta\gamma^s, \Delta r^s$

$$\left\{ \begin{array}{l} \underline{\underline{E}}^* - \underline{\underline{E}}^e - \left\{ \underline{\underline{N}}^s \underline{\underline{C}}^e \right\} \Delta\gamma^s = 0 \\ \Delta\gamma^s - \dot{\gamma}_0 \exp \left[-\frac{\Delta G(\tau_{eff}^s)}{k_B T} \right] \text{signe}(\tau^s) \Delta t = 0 \\ \Delta r^s - b \left(\frac{1}{A^s} - \frac{g_c(T)}{b} r^s \right) |\Delta\gamma^s| = 0 \end{array} \right.$$

avec $\underline{\underline{E}}^* = \frac{1}{2} (\underline{\underline{F}}^{*T} \underline{\underline{F}}^* - \underline{\underline{I}})$ où $\underline{\underline{F}}^* = \underline{\underline{F}}_{n+1} \underline{\underline{F}}_n^p$
une déformation d'essai

Difficultés liées à un pas de déformation important :

A la première itération, $\underline{\underline{\Delta E}} = \underline{\underline{\Delta E}}^e$ et si $\|\underline{\underline{\Delta E}}^e\|$ est trop importante, $\Delta\gamma^s$ n'est plus définie

➡ On stocke pas à pas $R_n^{\Delta E} = \frac{\|\underline{\underline{\Delta E}}_n^e\|}{\|\underline{\underline{\Delta E}}_n\|}$ et $\dot{\underline{\underline{E}}}_n^e = \frac{d\underline{\underline{E}}_n^e}{dt}$ Pour proposer un meilleur jeu de valeurs initiales

A la première itération, $\underline{\underline{\Delta E}}_{n+1}^e = \dot{\underline{\underline{E}}}_n^e \Delta t$

ou en cas de difficulté dans la minimisation de Newton $\underline{\underline{\Delta E}}_{n+1}^e = R_n^{\Delta E} \underline{\underline{\Delta E}}_{n+1}$

Enfin, si la première mesure de résidu est trop importante, redécoupage du pas de temps au sein de l'Umat



DMN/SRMA



Loi de comportement cristalline

Choix des variables de minimisation

$$\underline{\underline{E}}^e, \Delta\gamma^s, \Delta r^s$$

$$\begin{cases} \underline{\underline{E}}^* - \underline{\underline{E}}^e - \left\{ \underline{\underline{N}}^s \underline{\underline{C}}^e \right\} \Delta\gamma^s = 0 \\ \Delta\gamma^s - \dot{\gamma}_0 \exp\left[-\frac{\Delta G(\tau_{eff}^s)}{k_B T}\right] \text{signe}(\tau^s) \Delta t = 0 \\ \Delta r^s - b \left(\frac{1}{A^s} - \frac{g_c(T)}{b} r^s \right) |\Delta\gamma^s| = 0 \end{cases}$$

À la fin de la minimisation, on obtient :

$$\underline{\underline{E}}_{n+1}^e, \gamma_{n+1}^s, r_{n+1}^s$$



Puis : $\underline{\underline{F}}_{n+1}^p = \underline{\underline{F}}_n^p + \Delta\gamma^s \underline{\underline{N}}^s$ et $\underline{\underline{F}}_{n+1}^e = \underline{\underline{F}}_{n+1} \underline{\underline{F}}_{n+1}^p^{-1}$ mais alors $\underline{\underline{E}}_{n+1}^e \neq \frac{1}{2} \left(\underline{\underline{F}}_{n+1}^e \quad \underline{\underline{F}}_{n+1}^e \quad - \underline{\underline{I}} \right)$

Du coup, on retire $\underline{\underline{E}}^e$ de la liste des variables libres dans le processus de minimisation

$$\begin{cases} \Delta\gamma^s - \dot{\gamma}_0 \exp\left[-\frac{\Delta G(\tau_{eff}^s)}{k_B T}\right] \text{signe}(\tau^s) \Delta t = 0 \\ \Delta r^s - b \left(\frac{1}{A^s} - \frac{g_c(T)}{b} r^s \right) |\Delta\gamma^s| = 0 \end{cases}$$

Avec pour valeurs initiales, le résultat du processus de minimisation précédent après quelques itérations

On obtient : $\gamma_{n+1}^s, r_{n+1}^s$ puis

$$\underline{\underline{F}}_{n+1}^p = \underline{\underline{F}}_n^p + \Delta\gamma^s \underline{\underline{N}}^s \quad \underline{\underline{S}}_{n+1} = \underline{\underline{C}}^e : \underline{\underline{E}}_{n+1}^e$$

$$\underline{\underline{F}}_{n+1}^e = \underline{\underline{F}}_{n+1} \underline{\underline{F}}_{n+1}^p^{-1} \quad \text{et} \quad \underline{\underline{E}}_{n+1}^e = \frac{1}{2} \left(\underline{\underline{F}}_{n+1}^e \quad \underline{\underline{F}}_{n+1}^e \quad - \underline{\underline{I}} \right) \quad \underline{\underline{\sigma}}_{n+1} = \frac{1}{J} \underline{\underline{F}}_{n+1}^e \underline{\underline{S}}_{n+1} \underline{\underline{F}}_{n+1}^e \quad \underline{\underline{T}}$$

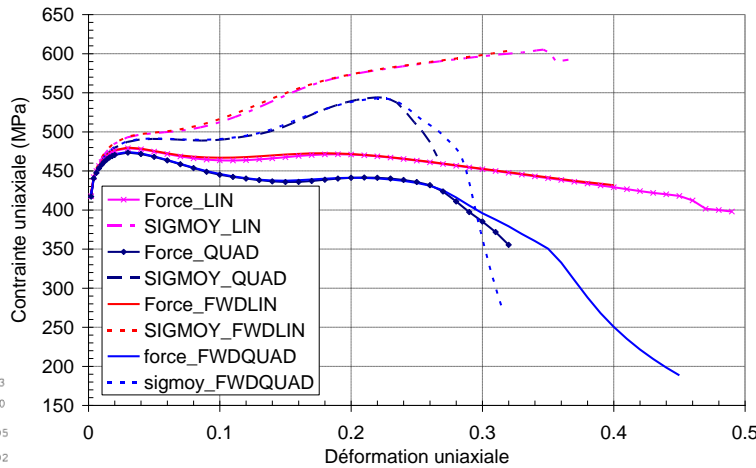


DMN/SRMA

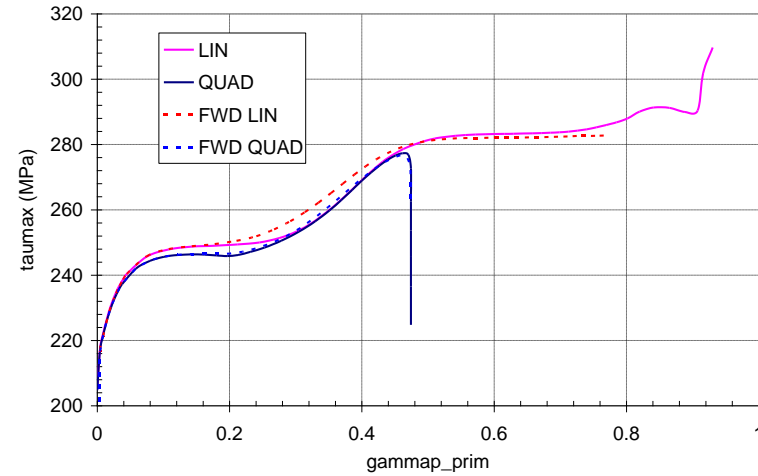


Loi de comportement cristalline

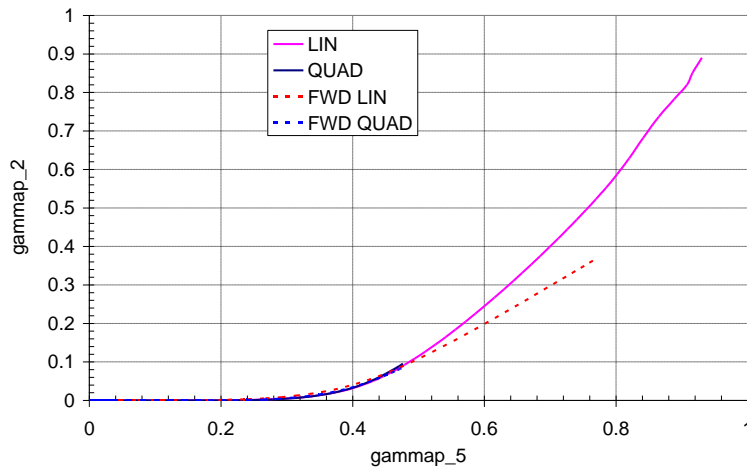
Application au cas d'une traction sur monocristal glissement double :



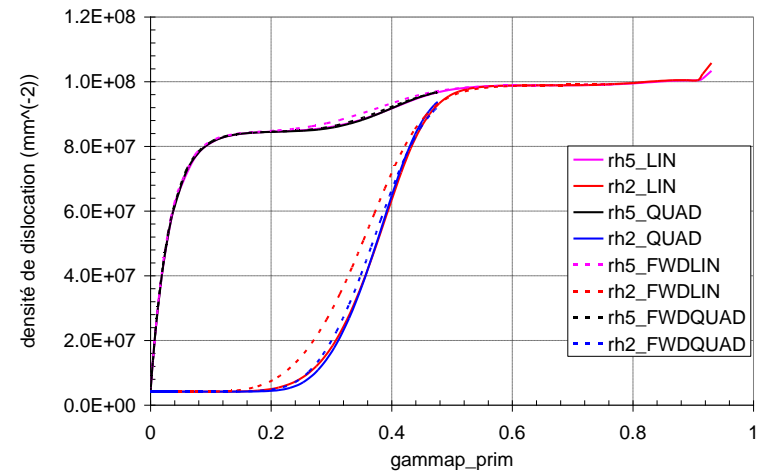
Réponse Macro



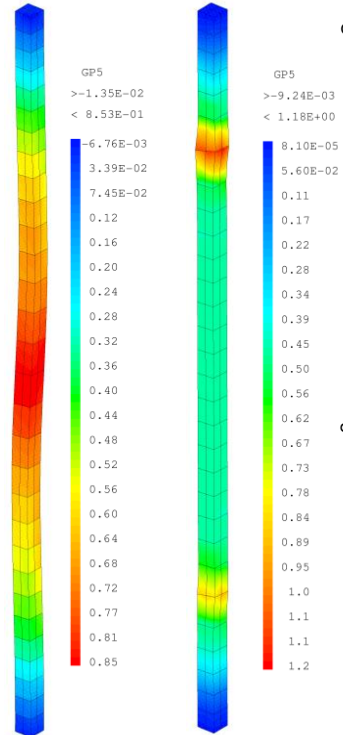
Centre de la poutre



Centre de la poutre



Centre de la poutre



CUB8 CU20



DMN/SRMA



PLAN

- Introduction – Contexte
- Localisation de la contrainte :
 - . Expérimentale
 - . Polycristalline
 - . Eléments finis
- Loi de Comportement
- Résultats – Analyse**
- Conclusion - Perspectives



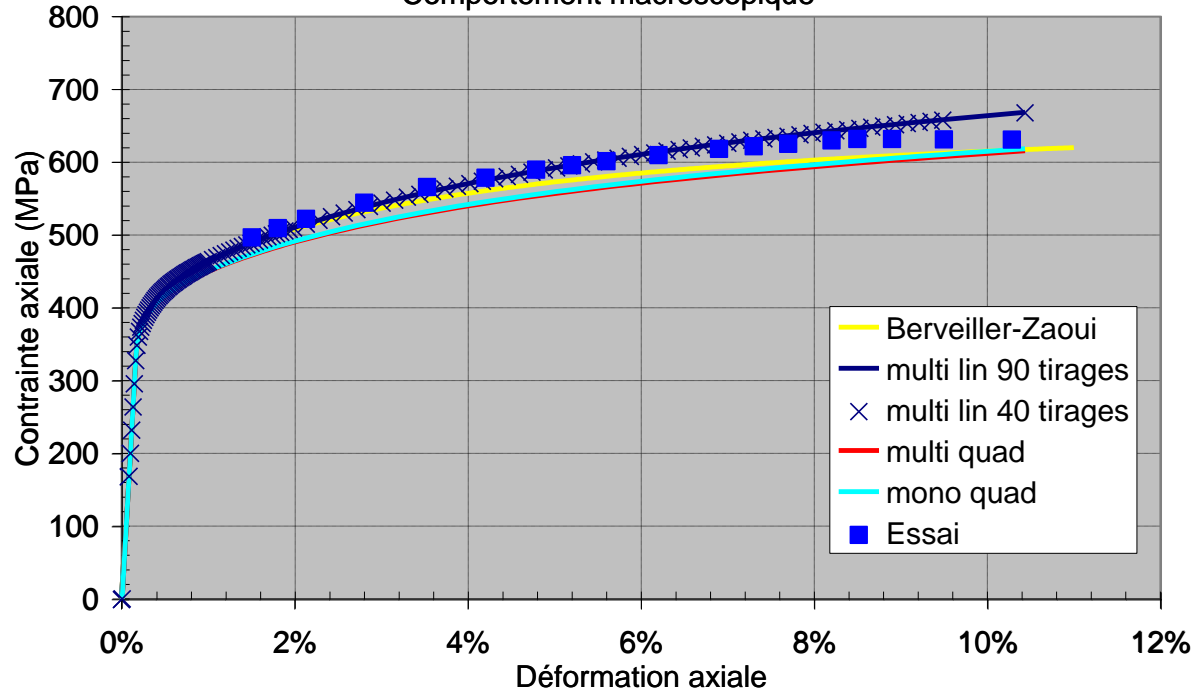
Résultats Macros

Cubes contenant 30 grains, 125 elem/grain

Conditions aux limites périodiques

DMN/SRMA

Comportement macroscopique

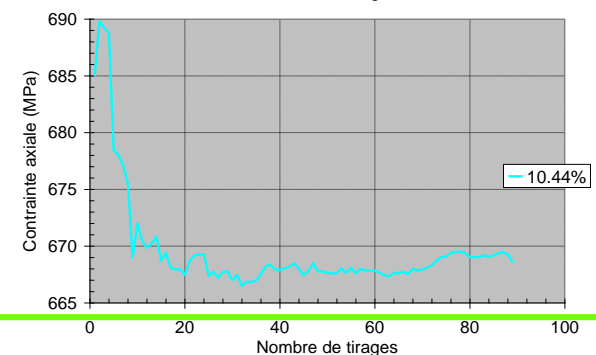
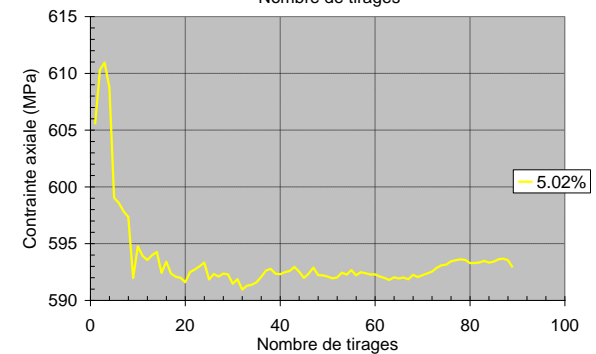
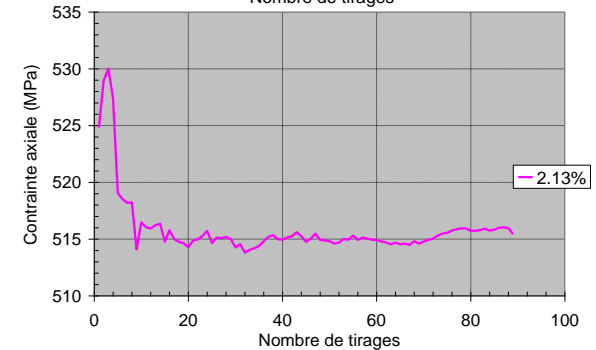
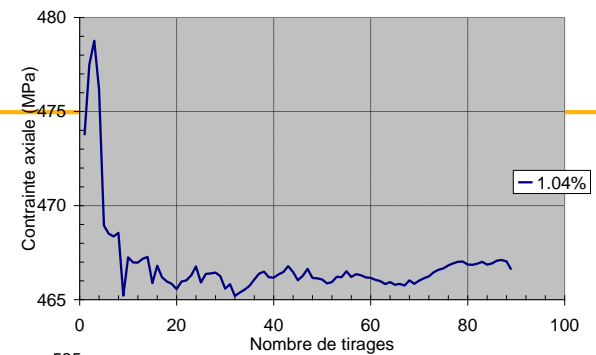


Mise en évidence d'un effet de la fonction de forme des éléments

Comportement BZ intermédiaire

Grandes Défs non prises en compte dans BZ

Stabilisation de la réponse après ≈ 40 tirages.

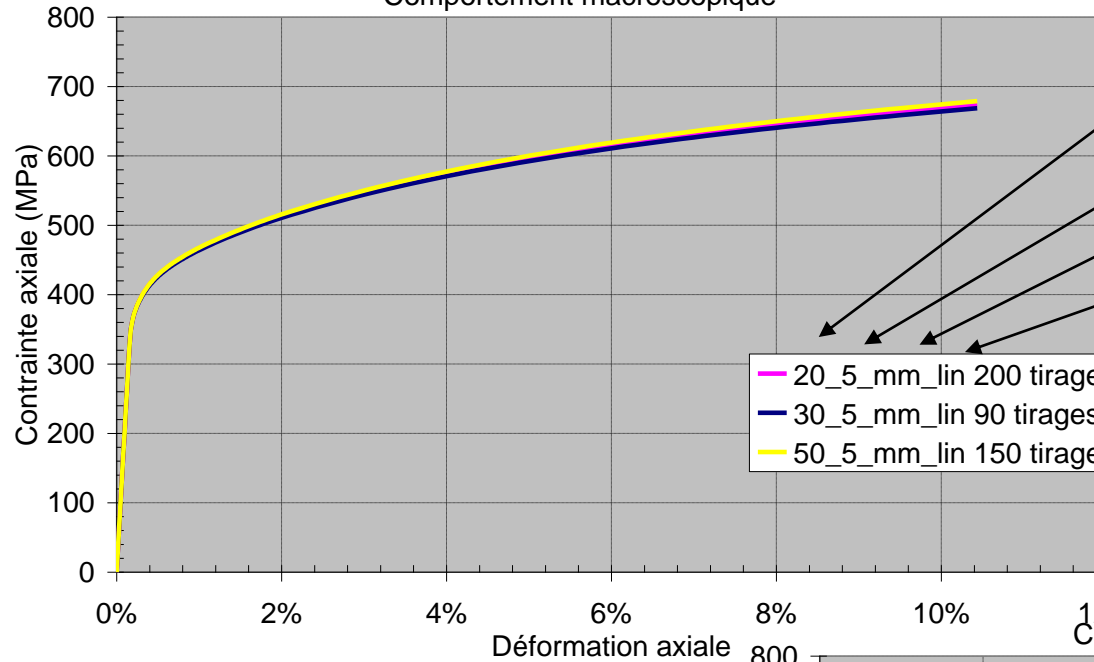




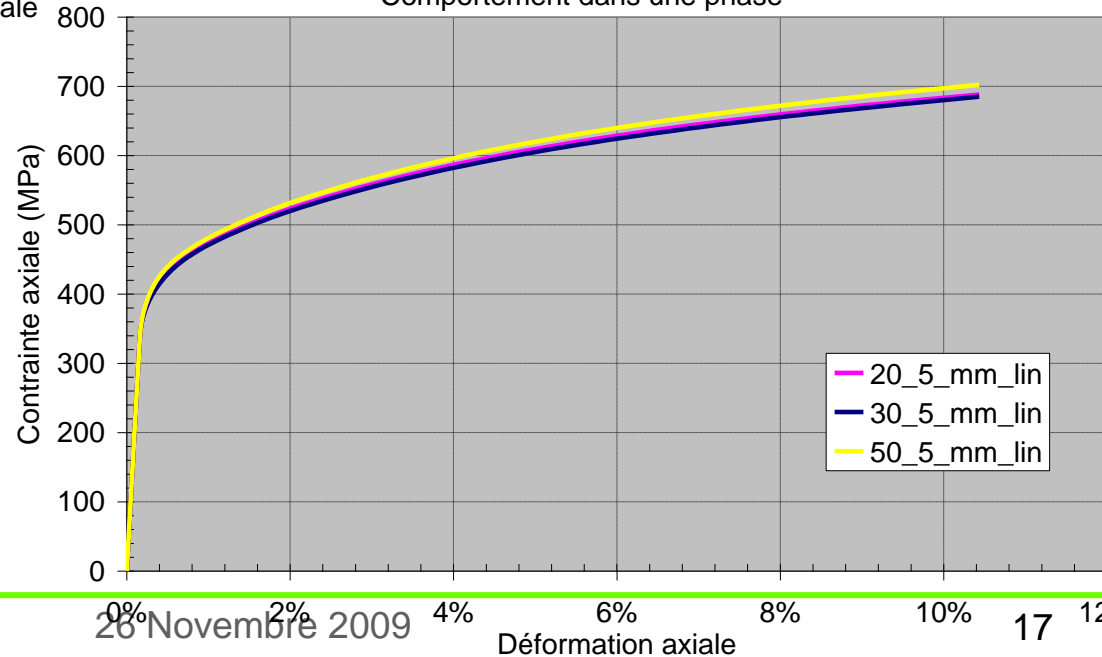
Effet du nombre de grains

Comportement macroscopique

DMN/



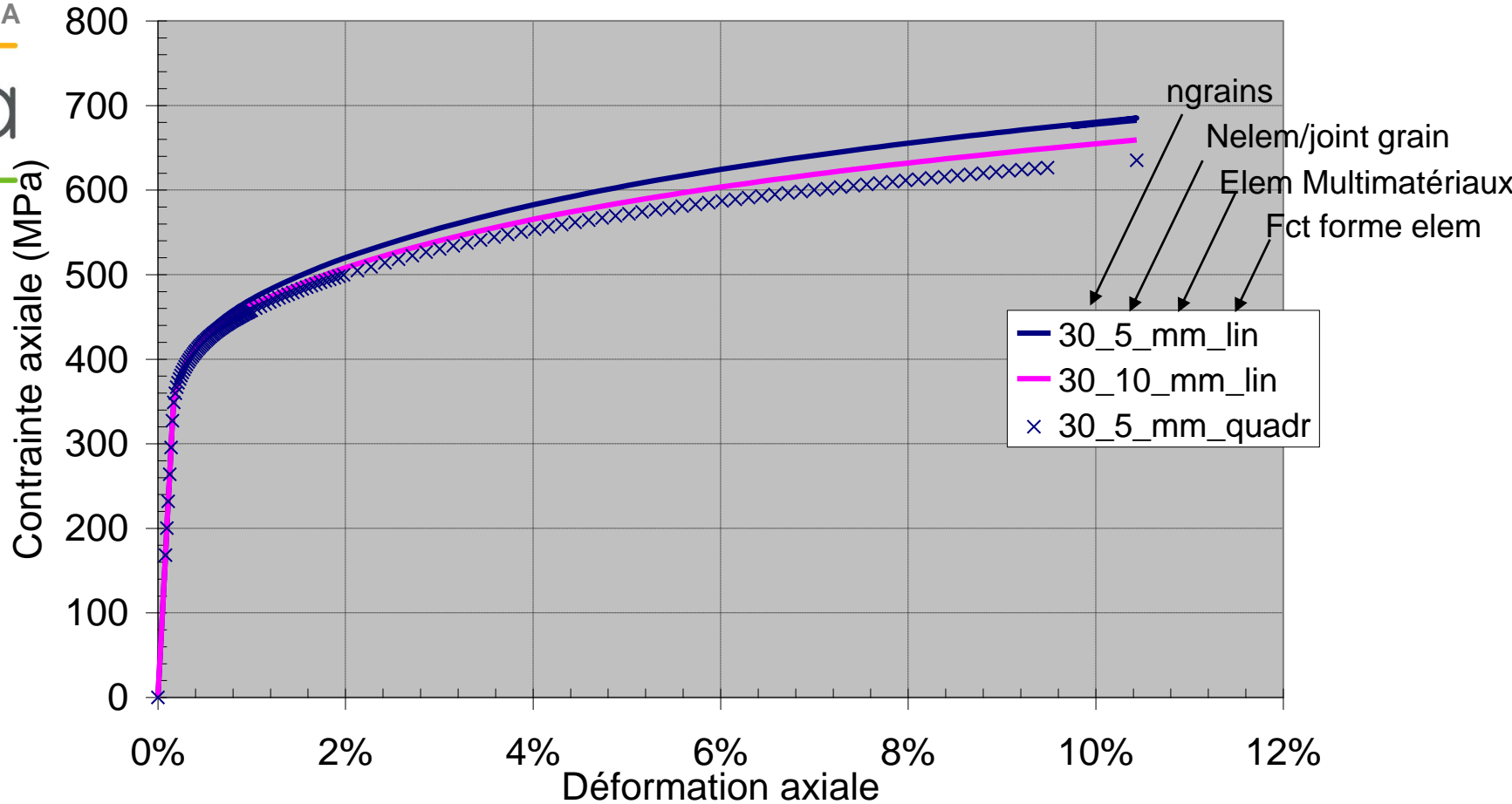
Comportement dans une phase





Effet de maillage : Réponse d'1 orientation sur un seul calcul

DMN/SRMA



Ensemble des calculs réalisés par la suite avec :

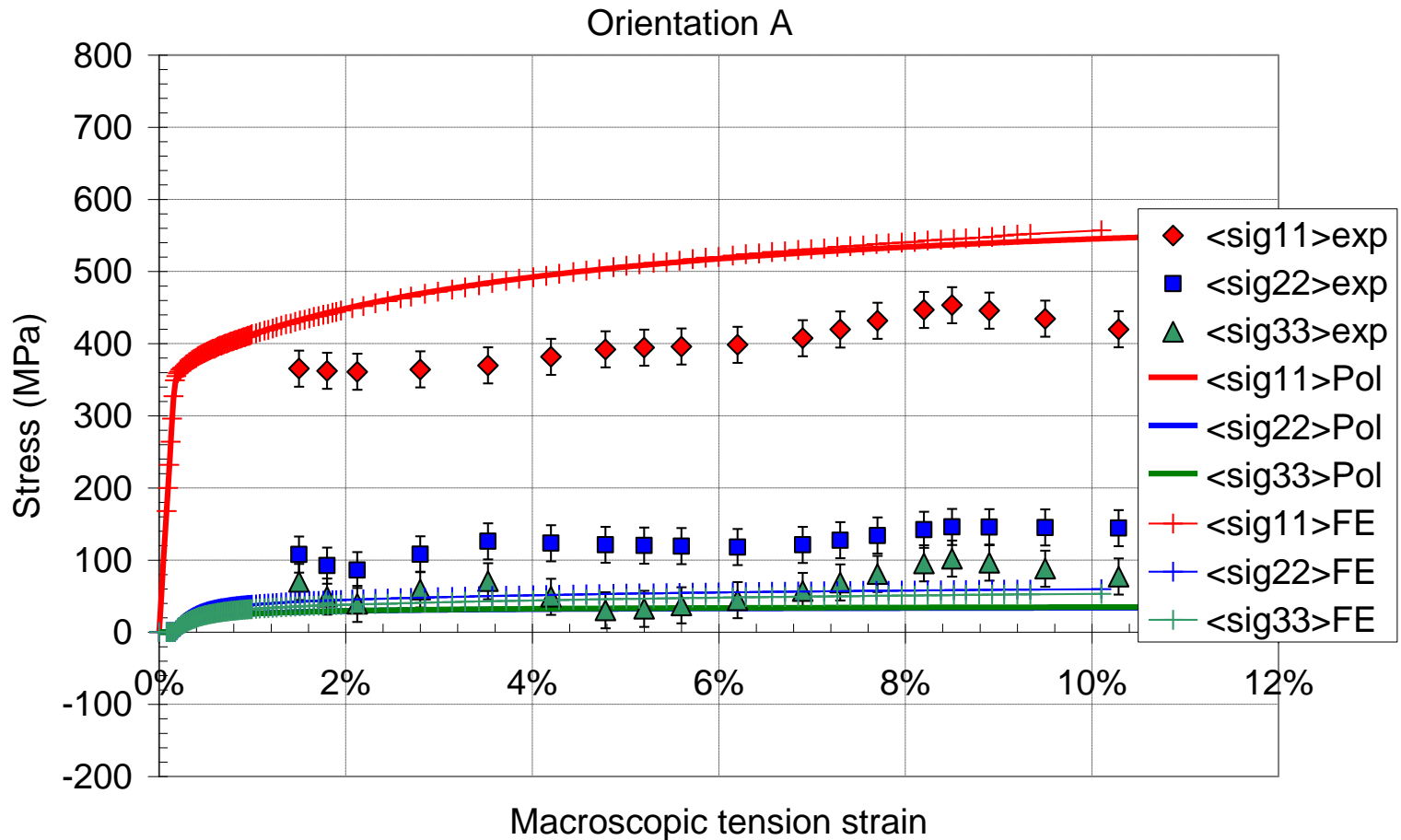
30 grains en moyenne

5 éléments en moyenne par joint de grains

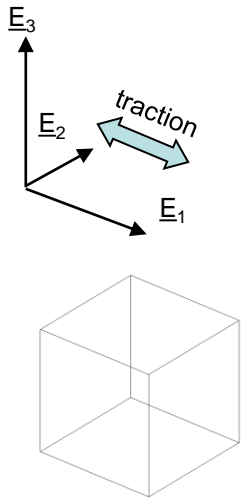
Elements multimatériaux avec fonction de forme quadratique

Au minimum 40 calculs par orientation cristalline

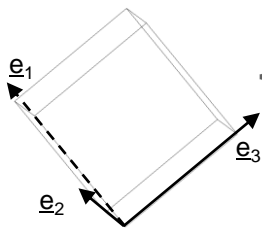
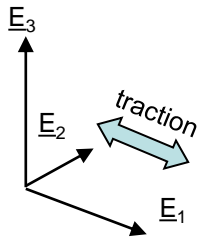
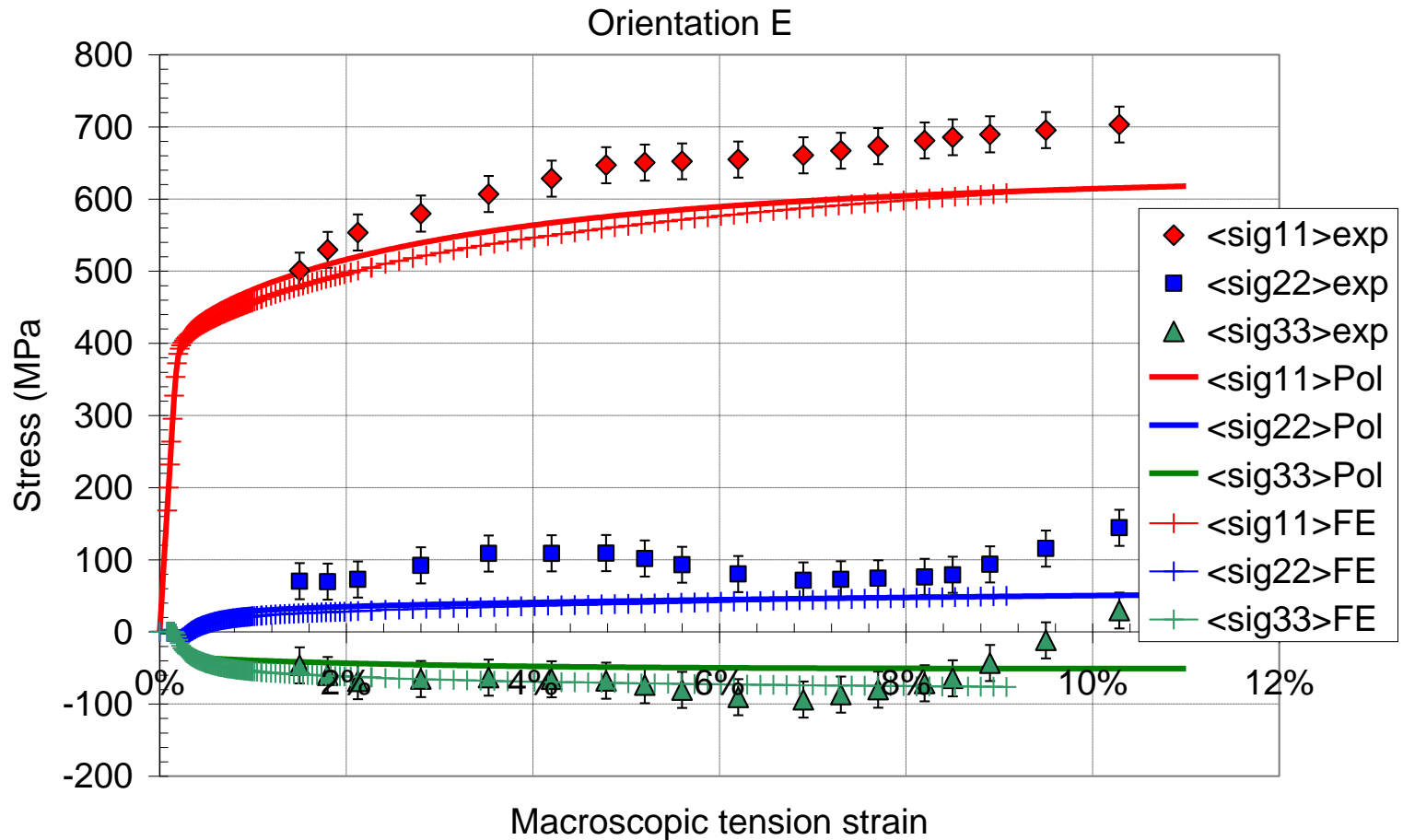
Résultats par phase



{001}<100> Plan de clivage perpendiculaire à la direction de traction
Facteur de Schmid max = 0,47



Résultats par phase



$\{111\}\langle -211 \rangle$ syst de glissement $\{112\}\langle 111 \rangle$ perpendiculaire à la direction de traction $f_s=0,4$



DMN/SRMA

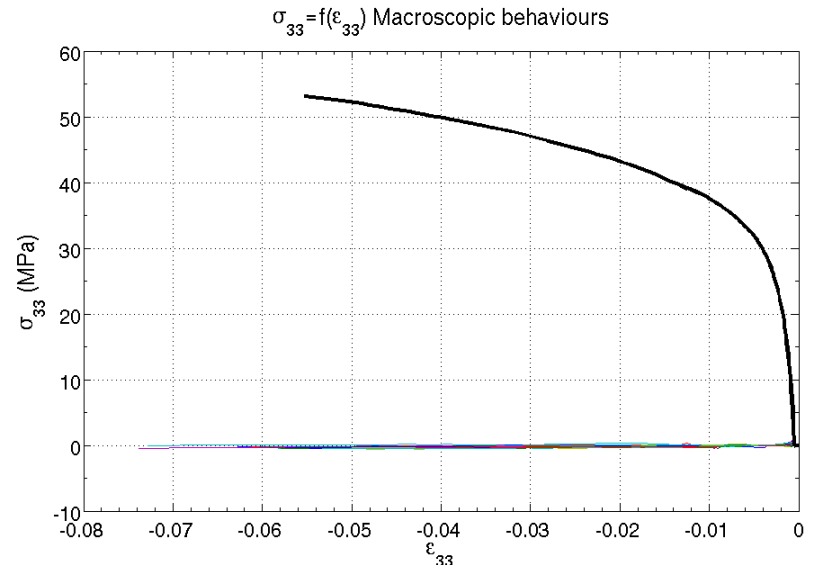
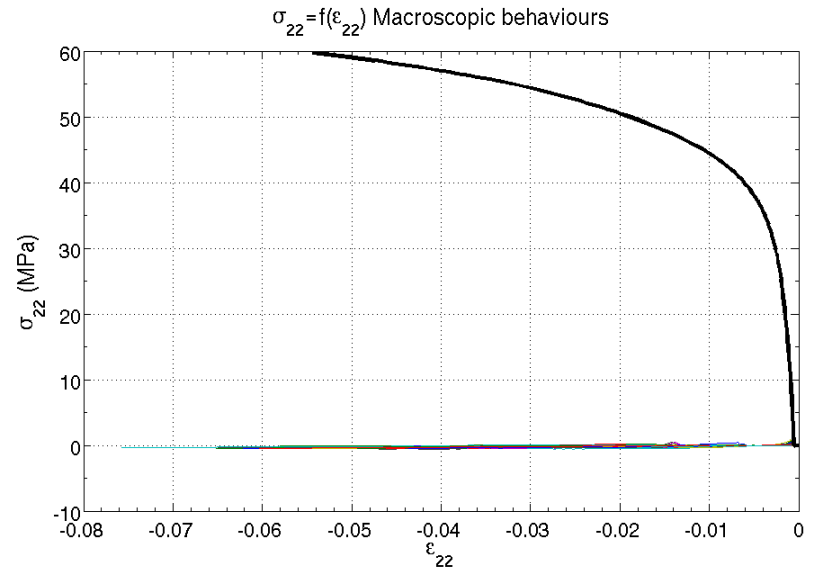
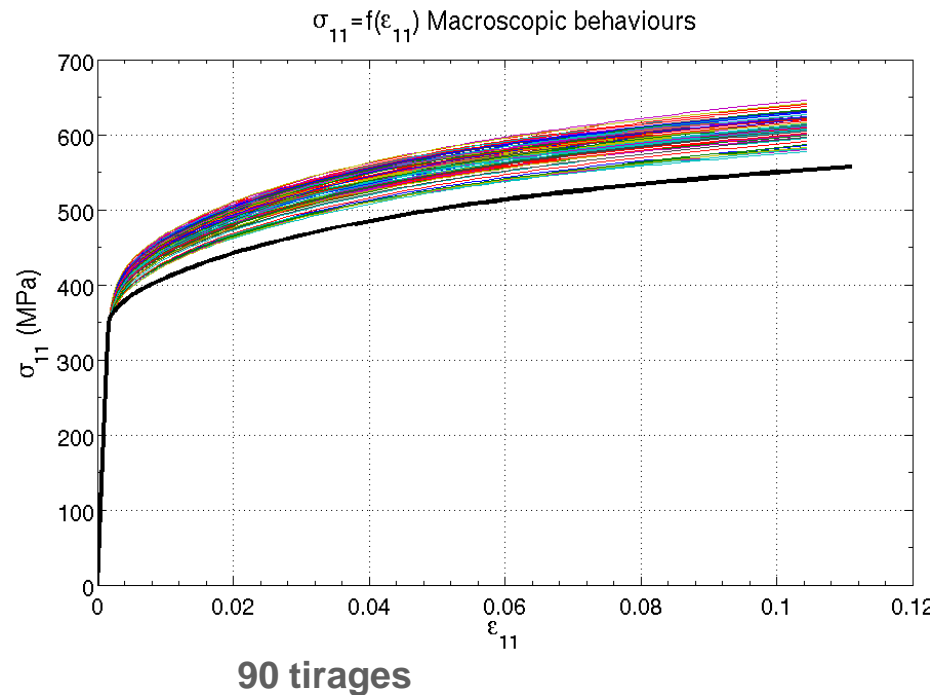


Dispersion par phase

En plus des valeurs moyennes par phase obtenues avec au minimum 40 tirages par orientation, les calculs par EF donnent accès à une dispersion de l'état de contrainte moyen par phase. Cette dispersion est due :

taille du volume < VER

→ Dispersion de la courbe macro à chaque tirage





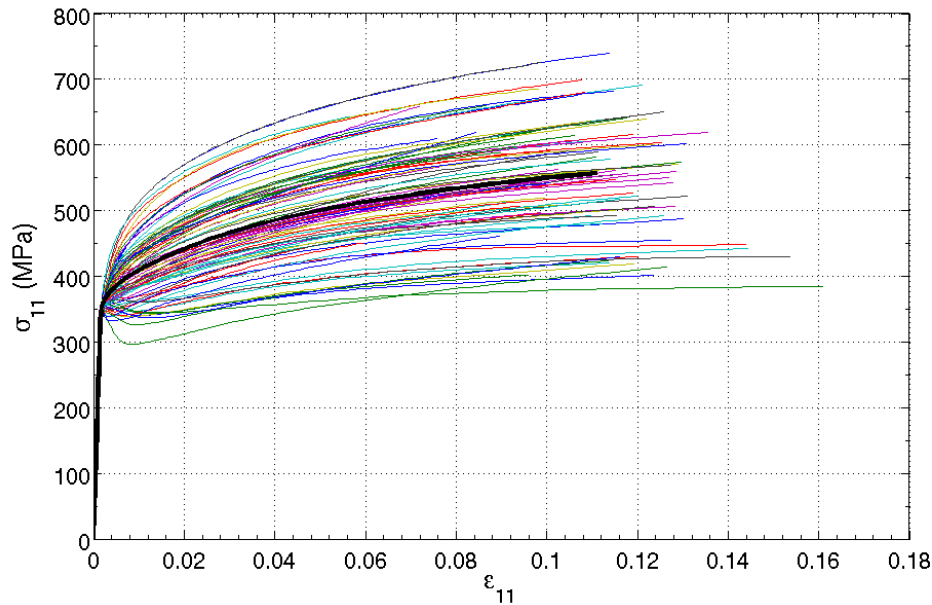
Dispersion par phase

DMN/SRMA

au voisinage

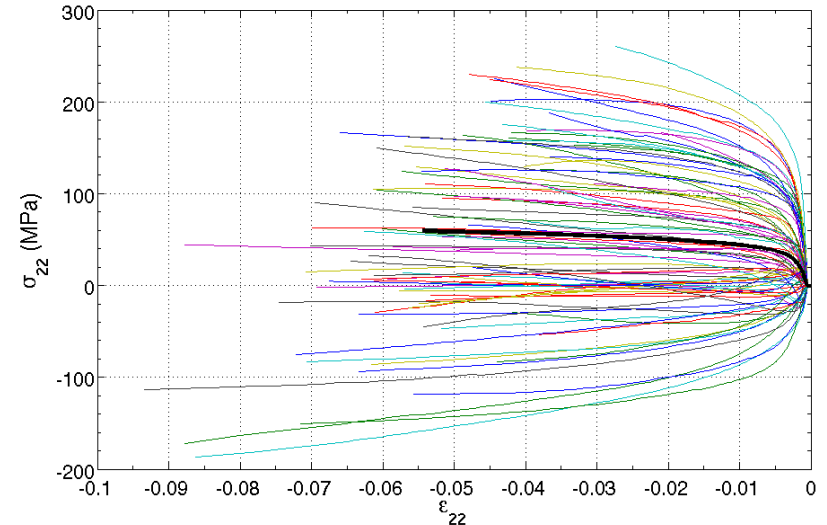


$\sigma_{11} = f(\epsilon_{11})$ behaviours in phase A

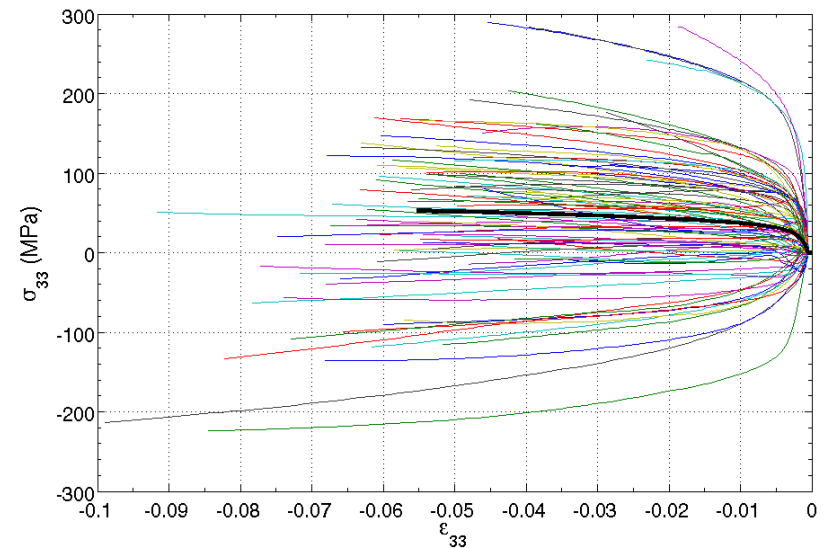


90 tirages

$\sigma_{22} = f(\epsilon_{22})$ behaviours in phase A



$\sigma_{33} = f(\epsilon_{33})$ behaviours in phase A



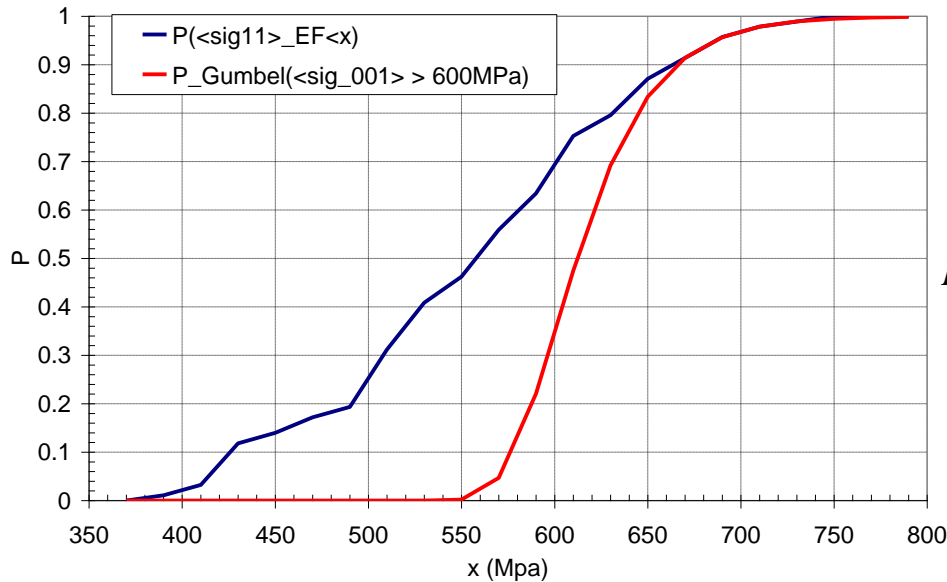


Probabilité de rupture fragile par clivage

DMN/SRMA



Orientation A : $\sigma_{11} = \sigma_{001}$



$$P(\sigma_{001} < x) = \exp\left(-\exp\left(-\left(\frac{x - \langle \sigma_I \rangle}{B}\right)\right)\right)$$

Condition de propagation d'un défaut de taille un paquet de latte bainitique

$$K_{IC} \approx \sqrt{E\Gamma_s} \text{ puis } \sigma_R \approx \frac{K_{IC}}{\sqrt{\alpha a}} \text{ avec } a \approx 10\mu\text{m}$$

$$\longrightarrow P_R(V_0) = 1 - P(\sigma_{001} < \sigma_R) = 1 - \exp\left(-\exp\left(-\left(\frac{\sigma_R - \langle \sigma_I \rangle}{B}\right)\right)\right)$$

À comparer avec un modèle plus classique type Beremin



DMN/SRMA



BILAN / Perspectives

Implantation numérique d'une loi de comportement cristalline en grandes transformations (intégration implicite, $\Delta\varepsilon \approx 1\%$)

Application d'une méthode de localisation numérique par éléments finis. Résultats en accord qualitatif avec :

- . Des données expérimentales**
- . Une modélisation polycristalline**

Utilisation des distributions de contrainte de clivage pour alimenter un modèle d'approche locale de la rupture fragile

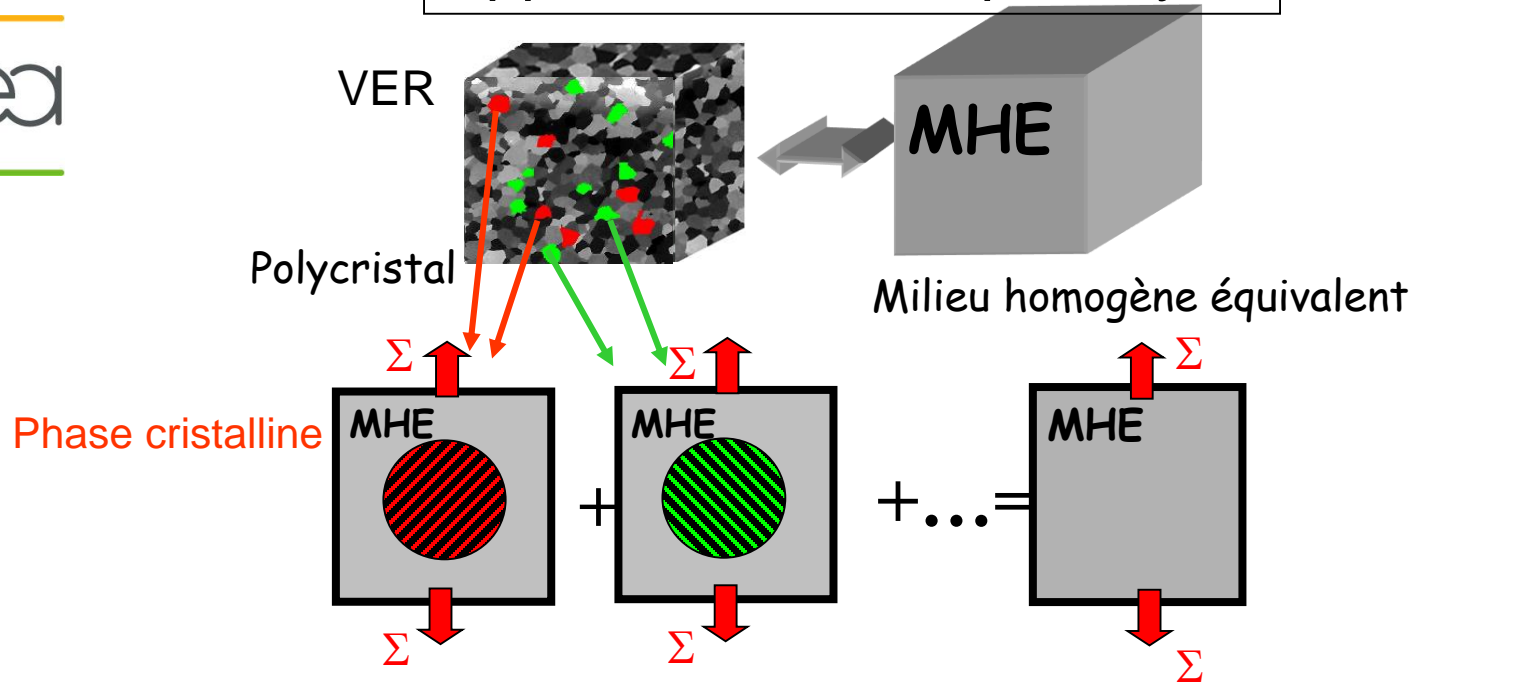
Difficultés rencontrées :

Temps de calcul et taille de microstructure

Pour (30 grains, $2,3 \cdot 10^5$ ddl, 10^5 Pts Gauss) $\varepsilon=10\% \approx 1$ jour sur bipro dualcore

Localisation du champ de contrainte

Approche en champs moyens



Localisation
Ici [Berveiller, Zaoui, 1979]

$$\underline{\underline{\sigma}}_g = \underline{\underline{\Sigma}} + 2\mu(1-\beta)\alpha \left(\underline{\underline{E}}^p \right) \left(\underline{\underline{E}}^p - \underline{\underline{\varepsilon}}_g \right)$$

Homogénéisation

$$\underline{\underline{E}}_p = \sum_g f_g \underline{\underline{\varepsilon}}_g$$

$$\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}_p = \frac{\dot{\gamma}^s}{2} \left(\underline{\underline{m}}^s \otimes \underline{\underline{n}}^s + \underline{\underline{n}}^s \otimes \underline{\underline{m}}^s \right)$$

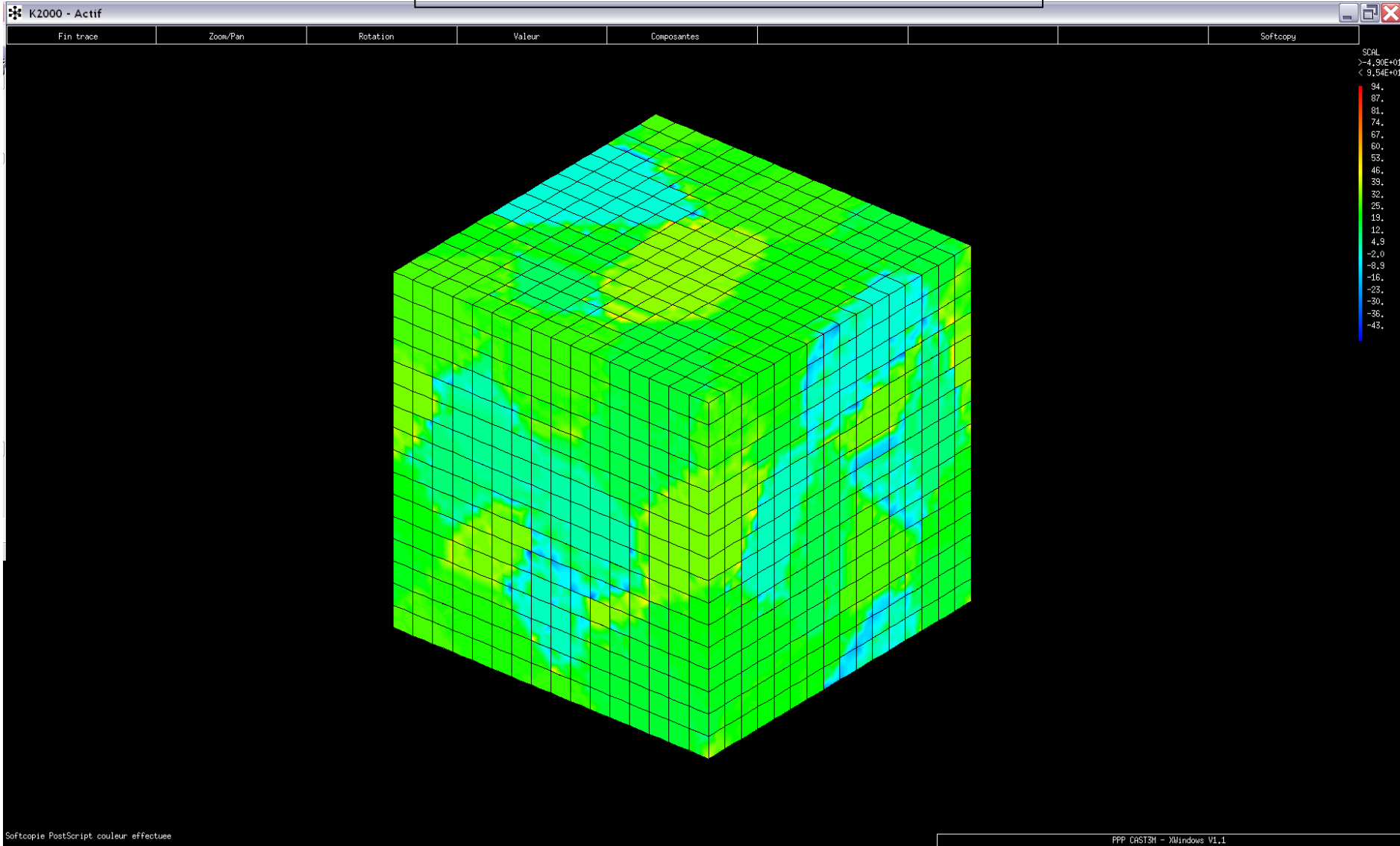
$$\frac{1}{\alpha} \cong 1 + \frac{3}{2} \mu \frac{\|\underline{\underline{E}}^p\|}{J_2(\underline{\underline{\Sigma}})}$$



DMN/SRMA

Localisation du champ de contrainte

Approche par Elements finis





DMN/SRMA

Localisation par EF

Calculs sur microstructures. Réponses macro et par phase.

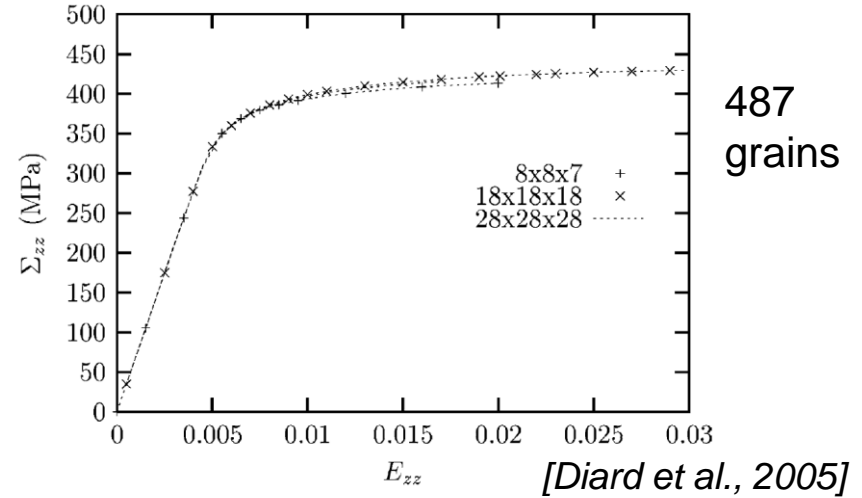
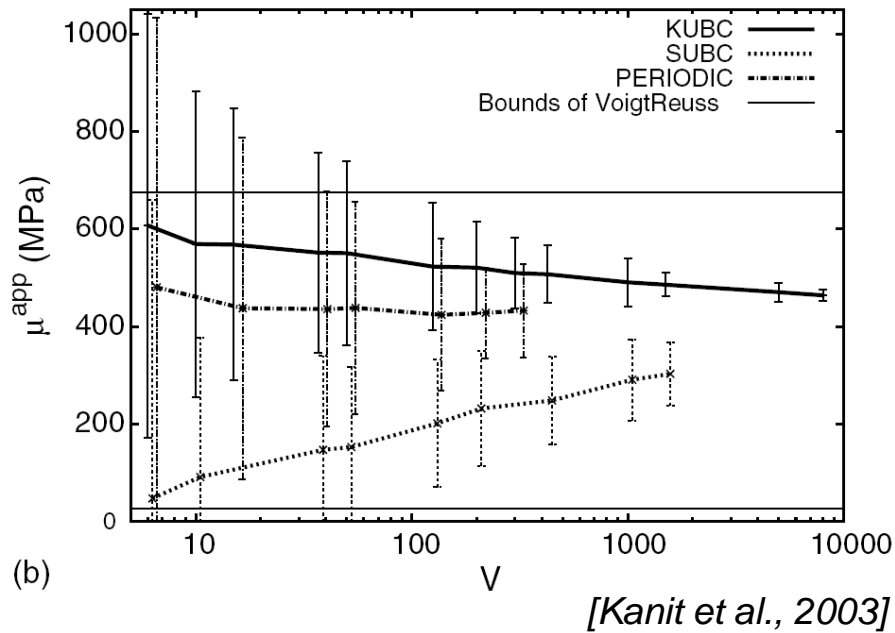
Influence de :



Conditions aux limites

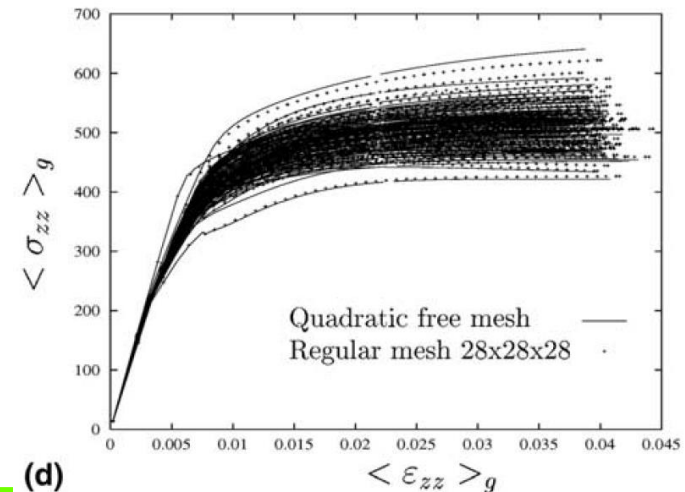
Nombre de grains

Maillage (type et nombre d'éléments)



Choix de conditions aux limites périodiques

Nombre de grains maximum





DMN/SRMA

Loi de comportement cristalline



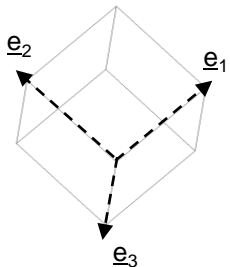
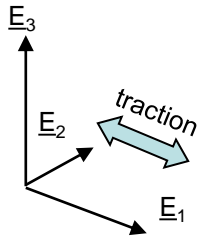
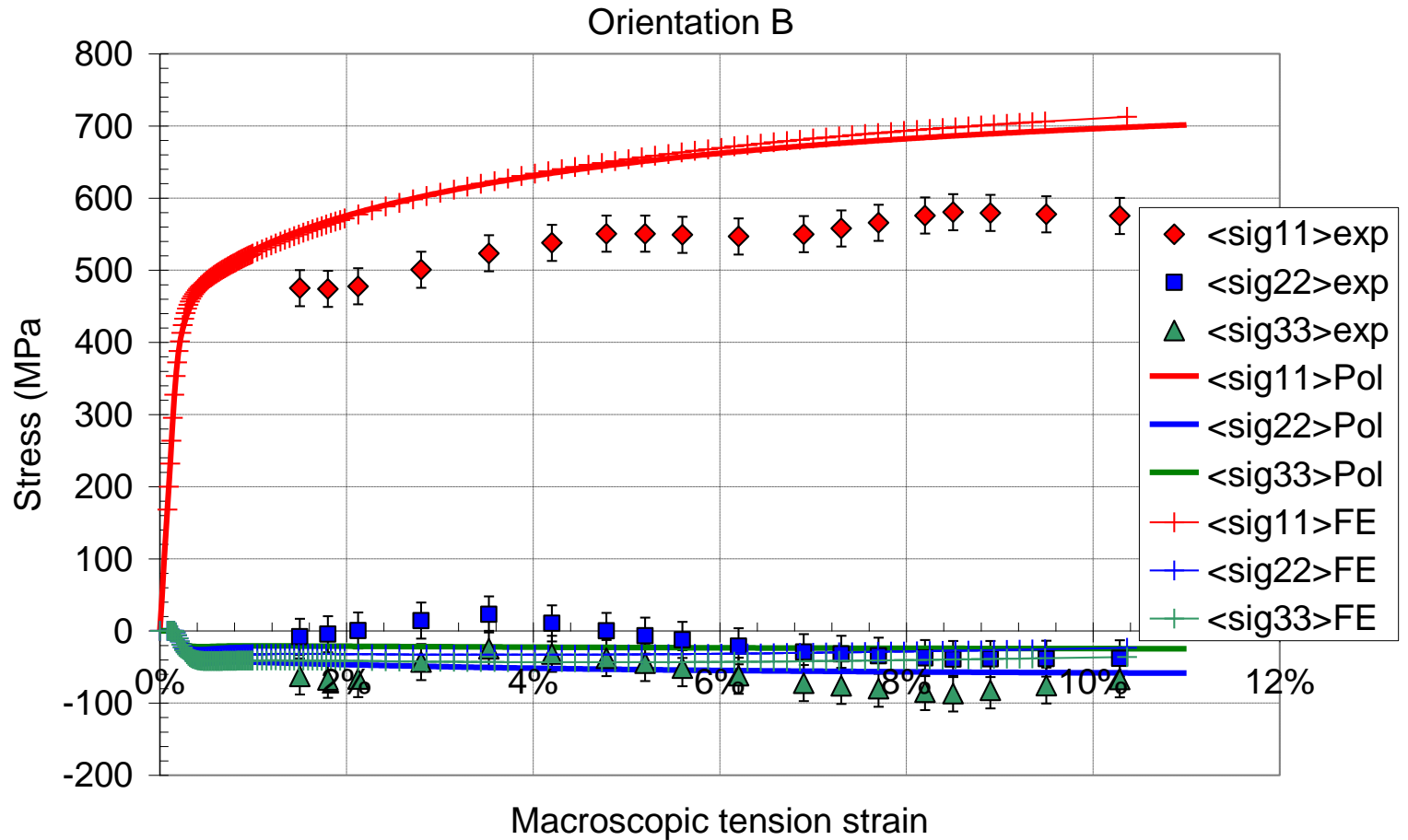
Bilan de l'implantation numérique implicite :

La procédure décrite permet de réaliser des calculs sur un élément de volume avec des pas de déformation de plusieurs pourcents

temps de calcul optimal pour des pas de l'ordre du pourcent.

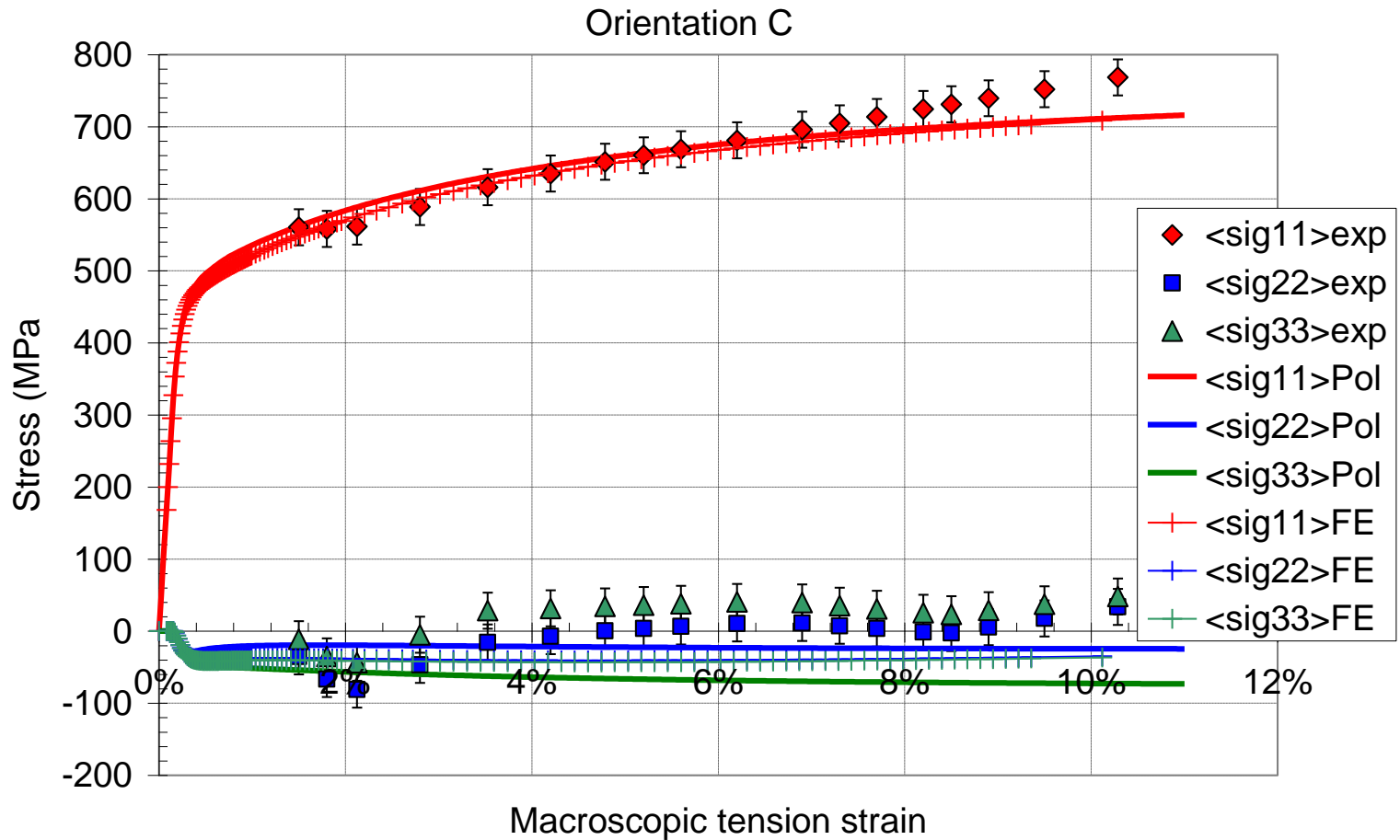
Mise en évidence d'un effet du type d'élément fini sur des simulations de traction d'une poutre monocristalline

Résultats par phase



$\{110\}\langle 1-11 \rangle$ syst de glissement $\{110\}\langle 111 \rangle$ dans la direction de traction $f_s < 0,32$

Résultats par phase



$\{11-2\}\langle 111 \rangle$ syst de glissement $\{112\}\langle 111 \rangle$ dans la direction de traction $f_s < 0,32$

