

Simulation de la réponse mécanique d'un acier inoxydable austénitique à l'aide de calculs cristallins

N. Rupin¹, J.M. Proix², F. Latourte¹, G. Monnet¹

¹ MMC, EDF R&D, France, {nicolas.rupin, felix.latourte, ghiath.monnet}@edf.fr

² AMA, EDF R&D, France, jean-michel.proix@edf.fr

Résumé — Ce travail s'intéresse au calcul multi-échelle cristallin par éléments finis. Il s'agit dans un premier temps de comprendre l'intérêt d'une telle démarche et les difficultés spécifiques qui apparaissent lors de sa mise en œuvre. Dans la suite, l'accent sera mis sur la forme de la loi de comportement à utiliser et la méthode d'intégration choisie dans le cadre d'une approche par éléments finis. L'objectif de pouvoir utiliser ce type de loi sur un problème comportant un grand nombre de degrés de liberté nécessite de traiter avec soin l'implémentation d'un tel modèle. Enfin, quelques confrontations qualitatives entre la formulation utilisée et des données expérimentales seront proposées.

Mots clés — calculs cristallins, loi de comportement, multi-échelle, rotation de réseau, 316L.

1 Contexte

Les composants de réacteurs nucléaires à eau sous pression (REP) sont soumis à des conditions de fonctionnement sévères, l'exploitant doit donc disposer de lois de comportement suffisamment fines pour permettre de justifier à tout moment l'intégrité de son matériel. En particulier, l'évolution micro-structurale au cours de la vie de la centrale pourrait être intégrée dans les lois utilisées afin de prendre en compte ces phénomènes physiques lors des calculs. Cette évidence a conduit EDF à s'intéresser aux approches multi-échelles permettant d'intégrer les effets du vieillissement des matériaux, sous l'action de sollicitations thermomécaniques, chimiques et neutroniques. Avant de pouvoir mettre en œuvre une telle approche, il est nécessaire de s'intéresser à la simulation de la réponse mécanique de polycristaux associés à l'échelle fine du matériau. Dans le cadre de cette étude, un matériau classique très utilisé dans les composants internes de la cuve des REP sera considéré, il s'agit d'un acier inoxydable de grade 316L présentant une structure cristalline cubique à faces centrées.

2 Simulation de la réponse mécanique des matériaux cristallins

Le calcul cristallin est un calcul de structure qui possède des spécificités notables du point de vue de sa formulation, les conditions aux limites ne sont par exemple pas connues dans leur détail. D'autres difficultés consistent en la formulation de la loi de comportement, l'identification de ses paramètres et son implémentation numérique dans un code de calcul. Ce sont ces dernières questions qui retiendront notre attention dans les développements suivants. Les mécanismes physiques de plasticité aux petites échelles peuvent être simulés, par exemple, par la Dynamique des Dislocations Discrètes (DDD). A partir de ces approches, de nombreux travaux visent à identifier des lois constitutives de l'écoulement plastique à l'échelle du milieu continu ([1], [2], ...). L'écoulement plastique des systèmes est régi par l'équation (1) liant la cission résolue sur le système considéré τ_s à sa vitesse de glissement $\dot{\gamma}_s$.

$$\dot{\gamma}_s = \dot{\gamma}_0 \left(\frac{|\tau_s|}{\tau_f + \tau_s^{\text{forest}}} \right)^n \text{sgn}(\tau_s) \quad \text{avec} \quad \tau_s = \underline{\underline{\sigma}} : \frac{1}{2} (\underline{m}_s \otimes \underline{n}_s + \underline{n}_s \otimes \underline{m}_s) \quad \text{et} \quad \text{sgn}(x) = \frac{x}{|x|} \quad (1)$$

L'écrouissage du matériau est décrit par l'évolution de la densité de dislocation ρ sur chaque système (2a), c'est l'évolution de cette variable interne qui influe sur l'évolution de la cission critique τ_s^{forest}

comme le montre l'équation (2b).

$$\dot{\rho}_s = \frac{1}{b} \left(A \frac{\sum_{j \in \text{forest}(s)} \sqrt{a_{sj}^{\text{eff}}} \rho_j}{\sum_{j=1,12} \sqrt{a_{sj}^{\text{eff}}} \rho_j} + B \sum_{j \in \text{copla}(s)} \sqrt{a_{sj}^{\text{eff}}} \rho_j - \gamma \rho_s \right) |\dot{\gamma}_s| \quad (2a)$$

$$\tau_s^{\text{forest}} = \mu b \sqrt{\sum_j a_{sj}^{\text{eff}}} \rho_j \quad (2b)$$

L'interaction entre systèmes de glissement (3) est modélisée par une matrice a_{ij} dont les termes sont identifiés à partir de calculs DDD.

$$a_{sj}^{\text{eff}} = \left(0.2 + 0.8 \frac{\ln(\alpha b \sqrt{\rho})}{\ln(\alpha b \sqrt{\rho_{\text{ref}}})} \right)^2 a_{sj} \quad \text{with} \quad \rho = \sum_i \rho_i \quad (3)$$

Tous les autres paramètres apparaissant dans les équations précédentes sont des constantes liées au matériau ou à son orientation dans l'espace. L'intérêt de se rapprocher des développements aux échelles fines est double. Ce dialogue permet d'une part d'enrichir le contenu physique du modèle et de permettre des échanges fructueux entre les communautés et, d'autre part, de pré-identifier les nombreux paramètres intervenant dans les lois de comportement. Cette loi de comportement a été implantée en utilisant une méthode d'intégration implicite dans le logiciel éléments finis Code_Aster [3]. Cette implémentation a nécessité de répondre à un certain nombre de questions concernant les inconnues à utiliser lors de la résolution, la forme de la matrice tangente à utiliser, l'utilisation d'un seuil d'activation pour les systèmes ou encore l'actualisation des orientations cristallines. Ces points seront détaillés lors de la présentation orale. Deux tests permettent de valider l'implémentation précitée : l'utilisation d'un cas test analytique simple et la comparaison à une implémentation explicite équivalente. Des essais de traction sur des monocristaux d'orientation variable sont ensuite réalisés. Le dépouillement de ces résultats permet de retrouver qualitativement les observations expérimentales existantes sur les monocristaux [4] comme par exemple l'activation des systèmes présentant les plus forts facteurs de Schmid ou l'identification des différents stades de la déformation des monocristaux (élasticité - glissement facile - activation de glissements secondaires). L'accent sera mis également sur des différences de convergence observées pour certaines orientations. Enfin, un calcul polycristallin sera présenté et les difficultés associées à sa mise en œuvre seront évoquées.

3 Conclusion

Les travaux présentés ici constituent une étape de la démarche permettant de faire le lien entre la simulation physique aux échelles les plus fines (ab initio, dynamique moléculaire, DDD...) et le calcul de structure sur des composants industriels de grande taille (internes de cuve REP par exemple). Si la démarche semble maintenant bien définie des limitations existent encore en termes de mise en œuvre (rapidité de convergence des algorithmes, utilisation des grandes transformations...). La contribution proposée permet de faire un bilan de l'existant, de montrer sa pertinence vis à vis de la physique visée et de souligner les points d'achoppement qui subsistent encore.

Références

- [1] B. Devincere, L. Kubin, T. Hoc. *Physical analyses of crystal plasticity by DD simulations*, Scr. Mater., elsevier, 741-746, 2006.
- [2] L. Kubin, B. Devincere, T. Hoc. *Modeling dislocation storage rates and mean free paths in face-centered cubic crystals*, Acta. Mater., elsevier, 6040-6049, 2008.
- [3] J.M. Proix. *Comportements elastoviscoplastiques mono et polycristallins*, Documentation du Code_Aster R5.03.11 www.code-aster.org, 1-40, 2010.
- [4] B. Jaoul. *Etude de la plasticité et application aux métaux*, Presse des Mines, 2008.