

DE LA RECHERCHE À L'INDUSTRIE



www.cea.fr

Simulation numérique de la viscoplasticité à l'échelle du polycristal d' UO_2

Doctorant :

Luc Portelette
CAD/DEC/SESC/LSC

Directeur de thèse :

Bruno Michel

Collaboration :

DEN/DEC - DAM/DPTA – DEN/DMN : R. Madec et L. Dupuy
LSC – CNRS/LMA : JC Michel

Université d'inscription - Ecole doctorale :

Aix-Marseille Université - ED353 Sciences pour l'ingénieur

Évènement et date :

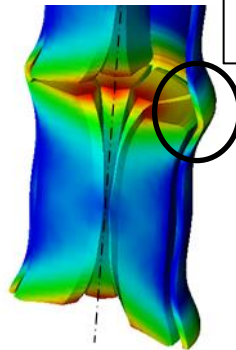
Journée utilisateurs MFront
30 Mai 2017

Sûreté et performances des éléments combustibles

Intégrité mécanique des éléments combustibles

Interaction Pastille Gaine

- La viscoplasticité permet d'accommoder les forces d'interaction mécanique



Risque de rupture de la gaine

Comportement des produits de fission gazeux (PFG)

- Risque de rupture par augmentation de la pression interne due aux gaz de fission relâchés
- Le comportement des PFG dépend de l'état **micro-mécanique** du combustible

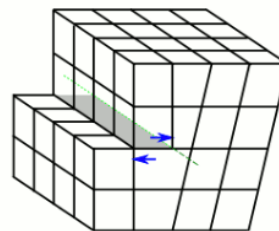
Le comportement viscoplastique de la pastille combustible joue un rôle important

Evolution de la microstructure du combustible sous irradiation

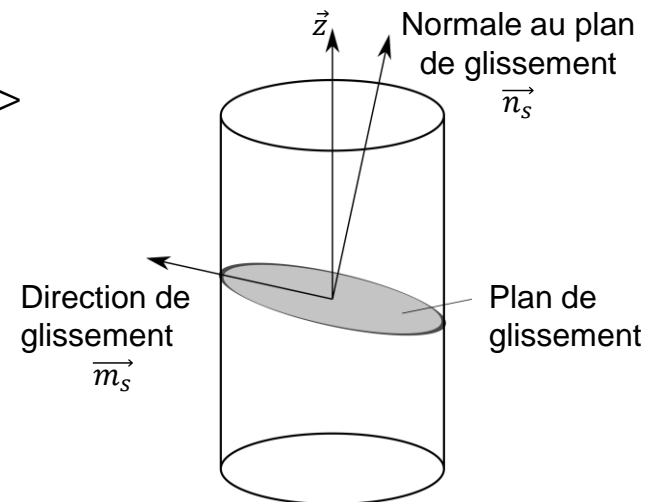
Nécessité d'une modélisation de la viscoplasticité à l'échelle microscopique

Impact des effets d'irradiation

- Origine de la viscoplasticité dans l' UO_2
 - Diffusion des défauts lacunaires
 - Mouvement des dislocations (glissement, montée)
- Le glissement des dislocations explique une part importante des déformations observées pour des sollicitations transitoires incidentelles et accidentelles
 - Essais sur combustible vierge (Sawbridge 1970, Guérin 1975, Lefebvre 1976)
- Caractérisation des mécanismes de glissement dans l' UO_2
 - Vecteur de Burgers de type $\langle 110 \rangle$
 - 3 familles de systèmes de glissement $\{n_s\} \langle m_s \rangle$
 - Famille 1 $\{100\}\langle 110 \rangle$
 - Famille 2 $\{110\}\langle 110 \rangle$
 - Famille 3 $\{111\}\langle 110 \rangle$



Cisaillement par une dislocation



Définition d'un plan de glissement et d'une direction de glissement d'une dislocation

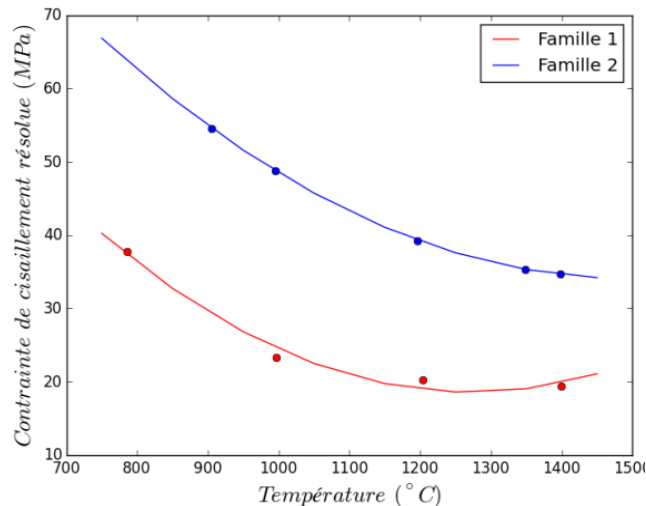
■ L'activation des systèmes de glissement dépendent de :

- La température
- L'orientation cristalline (anisotropie)
- La stœchiométrie

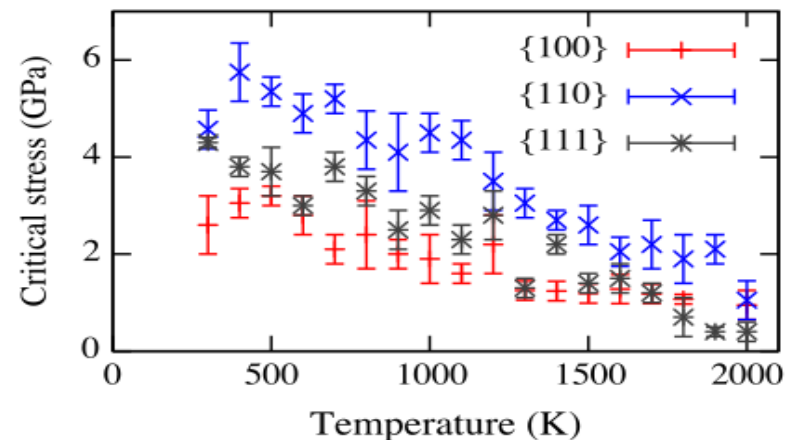
La famille 1 {100} est la plus facile à activer

La famille 2 {110} est la moins facile à activer

La famille 3 {111} est activée seulement par glissement dévié



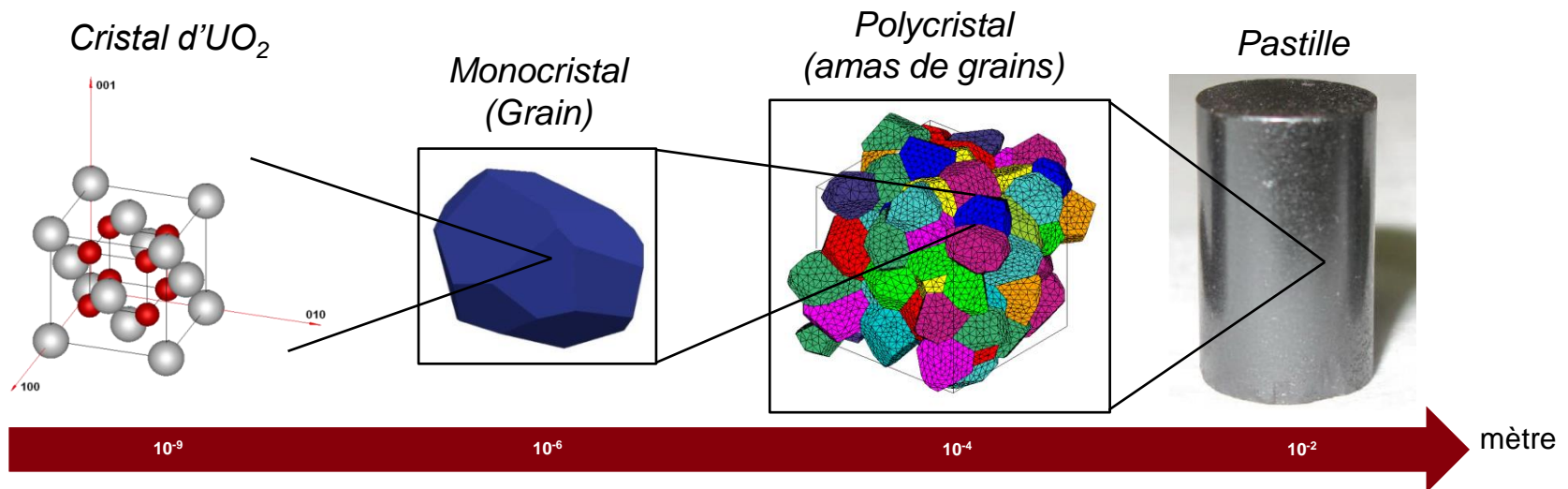
Contrainte de cisaillement résolue en fonction de la température (essais sur monocristaux [Lefebvre 1976])



Contrainte de cisaillement critique en fonction de la température (calculs MD [Fossati 2013])

Rapperport et Huntress – Nuclear Metals, 1960
Byron – J. of Nucl. Mat. – 1968
Yust et McHargue – J. of Nucl. Mat. – 1969
Sawbridge et Sykes – Phil. Mag. – 1970
Lefebvre – thèse – 1976
Alamo et al. – J. of Nucl. Mat. – 1978
Keller et al. – Acta Metall. – 1988
Fossati – J. of Nucl. Mat. – 2013

Modéliser le comportement viscoplastique à l'échelle du polycristal basé sur le mouvement des dislocations dans l' UO_2



■ Monocristal :

- Anisotropie viscoplastique (rôle de la famille 3)
- Durcissement par interaction des dislocations (lien avec l'effet d'irradiation et la taille de grain)

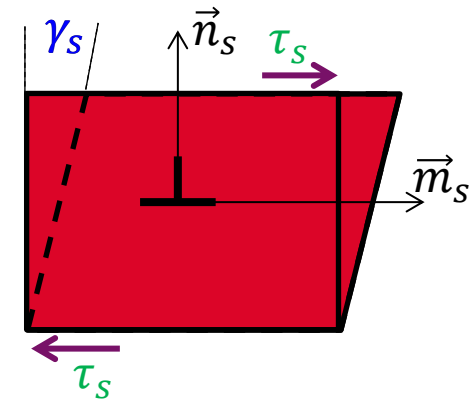
■ Polycristal :

- Validation aux échelles macroscopique (comportement moyen) et microscopique (hétérogénéité des contraintes et des déformations → comparaison de la simulation avec des examens MEB/EBSD)

1. Loi de comportement de viscoplasticité cristalline
2. Identification du modèle sur monocristal
3. Simulation et validation à l'échelle du polycristal
4. Conclusions et perspectives

1. LOI DE COMPORTEMENT DE VISCOPLASTICITÉ CRISTALLINE

Élément de volume cisailé par τ_s avec mouvement d'une dislocation dans le plan n_s et dans la direction m_s donnant un cisaillement γ_s



Loi de vitesse de cisaillement pour chaque système de glissement [Soulacroix 2014]

$$\dot{\gamma}_s = \dot{\gamma}_s^0 \exp\left(-\frac{Q_s}{k \cdot T}\right) \left(\cosh\left(\frac{\tau_s}{\tau_s^0}\right) - 1\right) \exp\left(-\frac{\tau_s^0}{\tau_s^f}\right)$$

Vitesse de cisaillement de référence pour chaque système

Activation thermique de type Arrhénius

Traduit la dépendance de la vitesse de cisaillement en fonction de la contrainte appliquée et de l'orientation cristalline

Traduit l'écrouissage dû aux interactions entre dislocations

$$\tau_s^f = \mu b \sqrt{\sum_r a^{rs} \rho^r}$$

Teodosiu (1975)
Madec (2001)
Fivel (2004)

1. LOI DE COMPORTEMENT DE VISCOPLASTICITÉ CRISTALLINE

Mise en place d'une formulation en grandes transformations pour les calculs par éléments finis

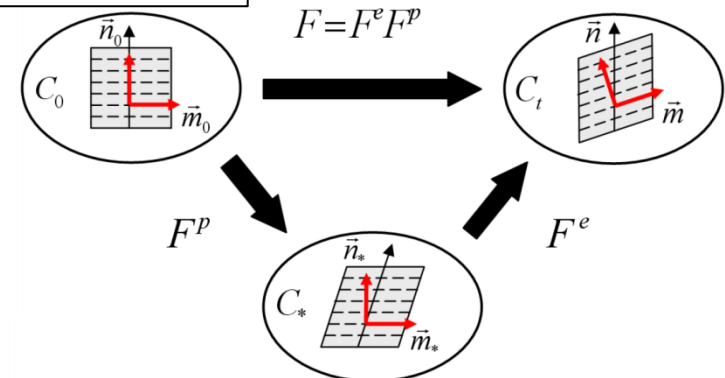
- Calcul de la rotation intragranulaire du réseau cristallin



$$\left\{ \begin{array}{l} \underline{\underline{S}} = \underline{\underline{E}} : \underline{\underline{E}}_{GL}^e \\ \underline{\underline{F}} = \underline{\underline{F}}^e \cdot \underline{\underline{F}}^p \\ \underline{\underline{E}}_{GL}^e = \frac{1}{2} (\underline{\underline{F}}^{eT} \cdot \underline{\underline{F}}^e - \underline{\underline{I}}) \\ \underline{\underline{\dot{F}}}^p \underline{\underline{F}}^{p-1} = \sum_s \dot{\gamma}_s \cdot \underline{\underline{\mu}}_s \\ \tau_s = \underline{\underline{\mu}}_s : \underline{\underline{M}} \\ \dot{\gamma}_s = \dot{\gamma}_s^0 \cdot \exp\left(-\frac{Q_s}{k \cdot T}\right) \left(\cosh\left(\frac{\tau_s}{\tau_s^0}\right) - 1\right) \exp\left(-\frac{\tau_s^0}{\tau_s^f}\right) \\ \tau_s^f = \mu b \sqrt{\sum_s a^{rs} \rho^r} \end{array} \right.$$

Formulation du problème en grandes transformations

Kroner (1958)
Lee (1969)
Asaro (1983)
Chao Ling (2017)



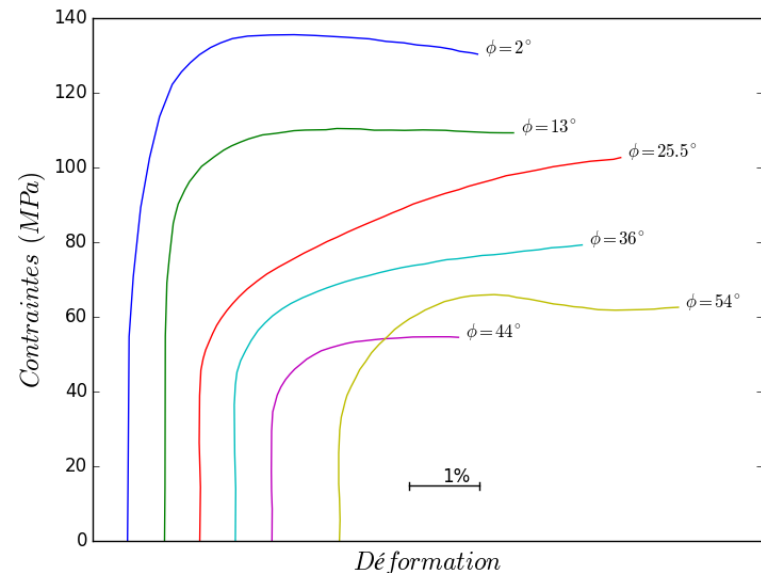
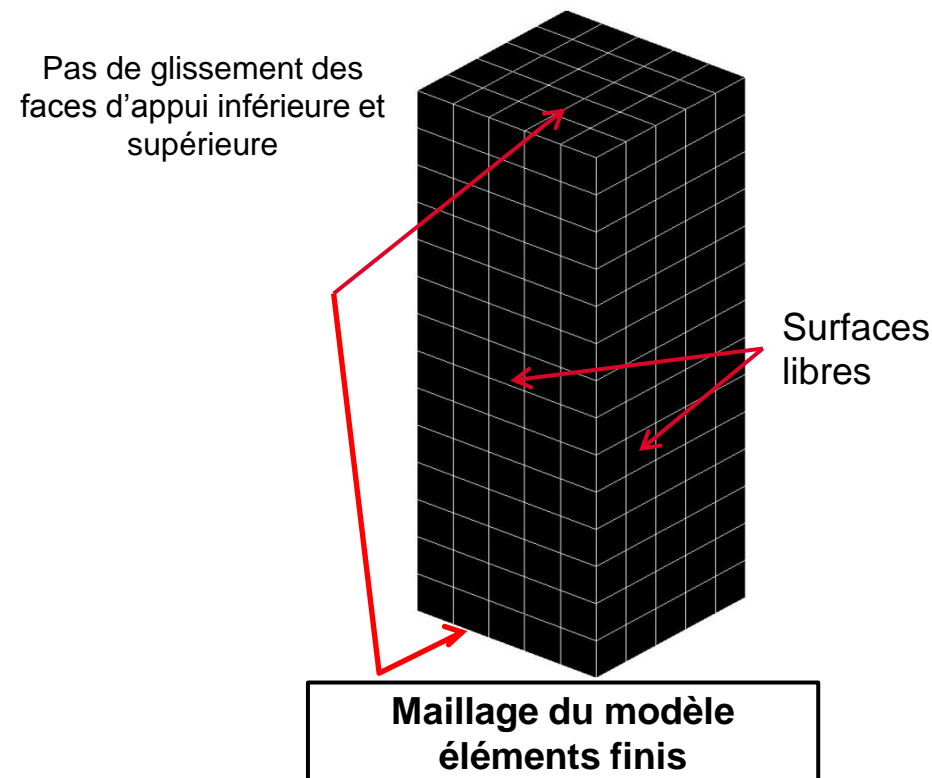
Décomposition élastique plastique
de la transformation

Amélioration de la loi de comportement intragranulaire

- Modification des équations constitutives pour la prise en compte de la famille 3

Nouvelle identification des paramètres

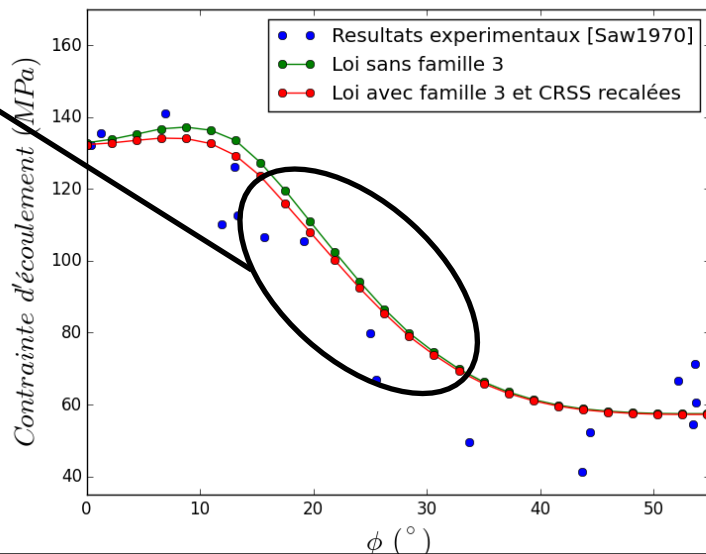
- Simulation par éléments finis des tests de compression sur monocristaux (Sawbridge 1970)



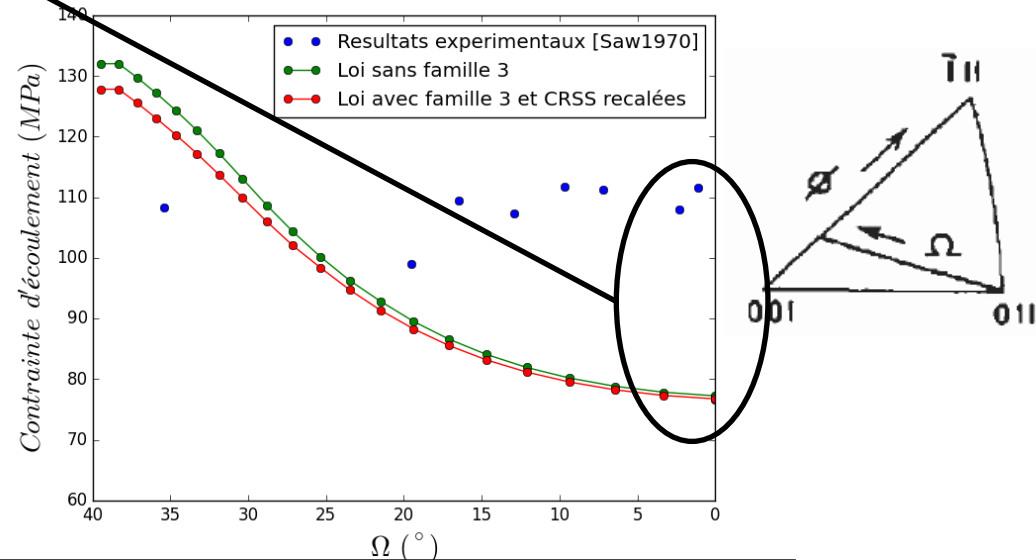
Courbes de Charges pour différentes orientations ϕ

Nouvelle identification des paramètres : résultats

- Légère surestimation de la contrainte d'écoulement
- Pas d'amélioration significative de la représentation de l'anisotropie avec la famille 3 (des questions subsistent sur l'activation de la famille 3 → MET in-situ Onofri et Le-Gros)
- Sous-estimation de la contrainte d'écoulement liée à l'absence de durcissement
(Interaction des systèmes de la famille 1)



Contrainte d'écoulement à 2% de déformation totale en fonction de l'orientation ϕ



Contrainte d'écoulement à 2% de déformation totale en fonction de l'orientation Ω

Caractérisation des coefficients pas Dynamique des Dislocations

$$\tau_s^f = \mu b \sqrt{\sum_r a^{rs} \rho^r}$$

Contrainte due à l'interaction d'un système mobile « s » avec les systèmes immobiles « r »

- μ : module cisaillement
- b : norme du vecteur de Burgers
- a^{rs} : matrice d'interaction
- ρ^r : densité de dislocations immobiles sur le système « r »

■ Matrice d'interactions entre les systèmes des 3 familles
(Matrice 24x24)

■ 18 Coefficients sont à déterminer par Dynamique des Dislocations (méthodologie [Madec 2001] basée sur MobiDic)

Étude préliminaire de sélection des jonctions

■ Cette étude montre que seuls 15 de ces coefficients sont à déterminer car 3 configurations ne sont pas favorables à l'interaction

■ De plus, un calcul utilisant l'approximation d'anisotropie élastique semble suffisant pour le calcul des coefficients

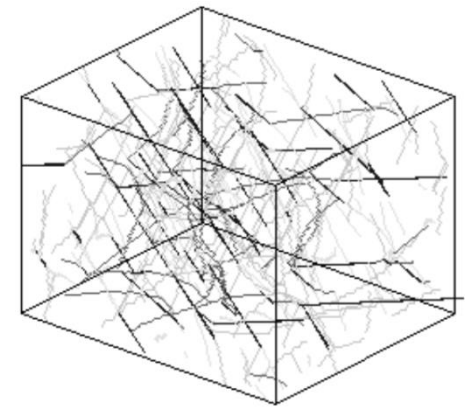


Image de la simulation modèle pour un coefficient d'interaction. En noir, les jonctions, en gris foncé le système mobile et en gris pâle la forêt [Madec 2001]

Collaboration avec :

- Ronan Madec (DAM) – MobiDic
- Laurent Dupuy (DMN) – Numodis
- Joël Douin (CEMES) – DisDi

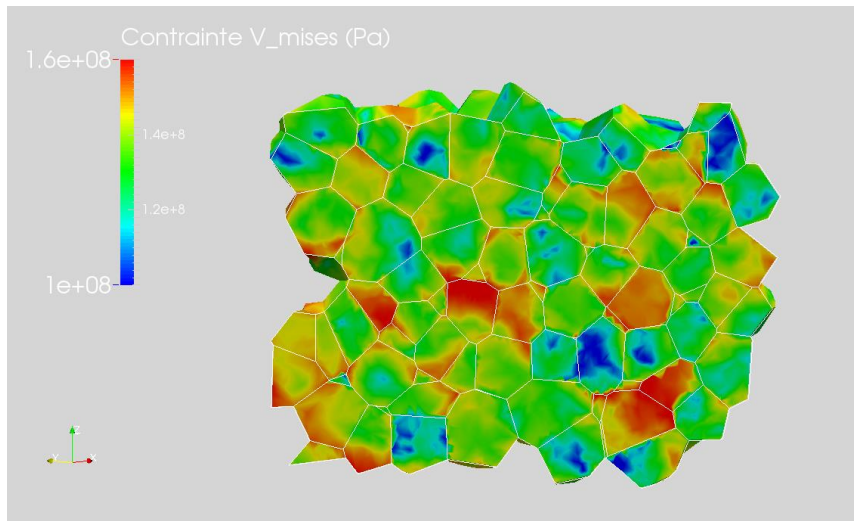
■ Essais de compression sur polycristaux (**Labo UO2 du DEC**)

- Guérin (1975) $T \in [1100; 1700]^{\circ}\text{C}$; $\dot{\epsilon} \in [10^{-5}, 10^{-3}] \text{s}^{-1}$, Dherbey 2001 - Menard (2007) – Ndiaye (2012), Salvo (2014) $T \in [1100; 1700]^{\circ}\text{C}$; $\dot{\epsilon} \in [10^{-3}, 10^{-1}] \text{s}^{-1}$

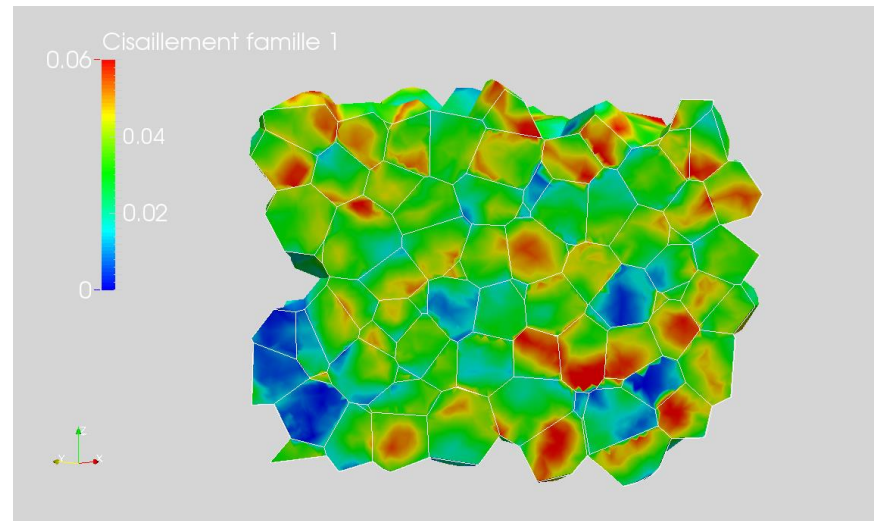
■ Dépendance à la vitesse de déformation en accord avec les résultats expérimentaux

■ Dépendance à la température à améliorer

■ L'hétérogénéité des contraintes et des déformations est confirmée par ces nouveaux résultats



Hétérogénéité des contraintes dans le polycristal

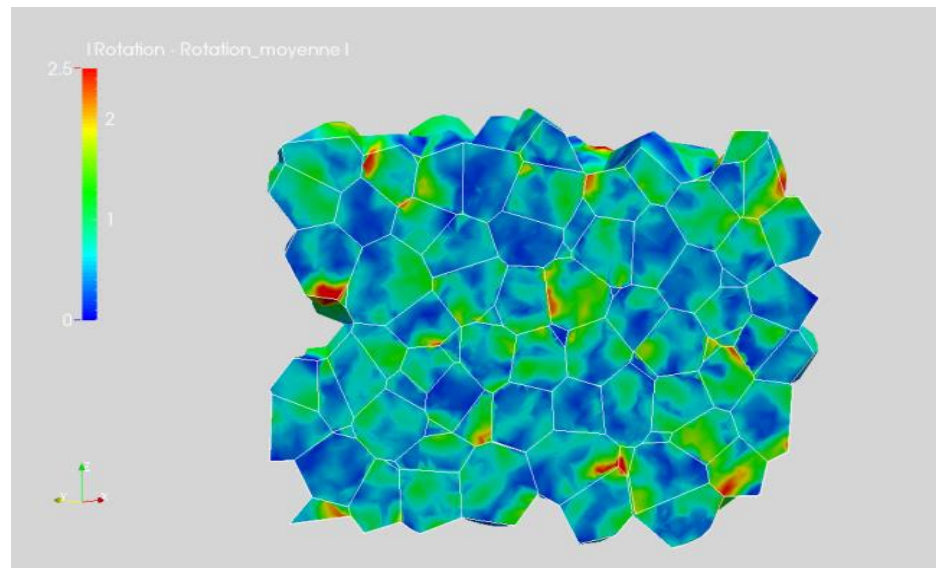


Déformation provoqué par la famille 1

Rotation du réseau cristallin : simulation

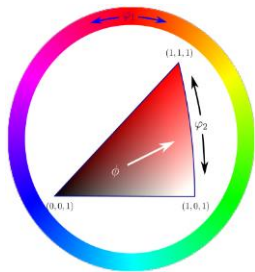
- L'incompatibilité des déformations dans le polycristal conduit à une rotation élastique du réseau cristallin
- La simulation par éléments finis permet de calculer cette rotation corrélée à l'hétérogénéité des contraintes et des déformations
- L'analyse des résultats de calcul met en évidence un gradient de rotation significatif dans certains grains

Désorientation du réseau cristallin
dans le polycristal après
déformation de fluage de 5% par
compression



Rotation du réseau cristallin : analyse expérimentale [M. Ben Saada, X. Ittis, JNM 15,16]

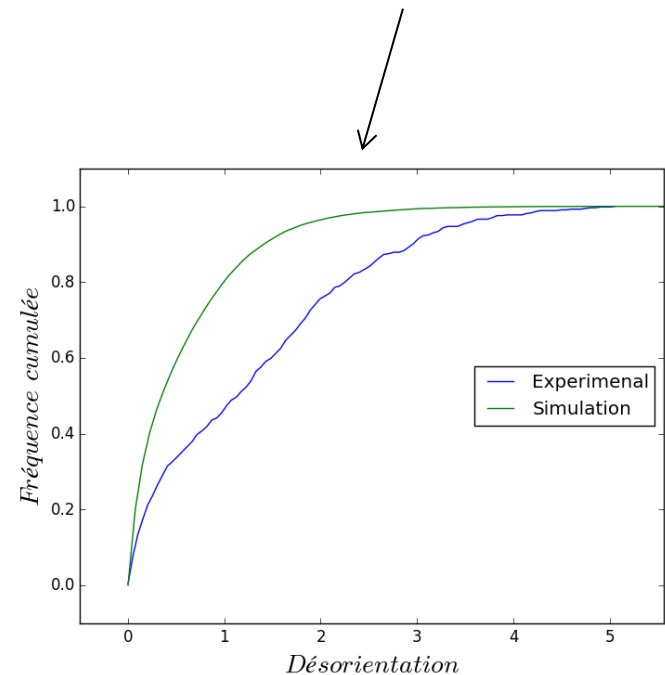
- Mise en évidence de gradient de rotation par examen MEB-EBSD au DEC, traduit par des sous joints dans certains grains après déformation
- Une comparaison statistique calcul/expérience sera réalisée pour la validation microscopique



Coloration
RGB
[Ibrahim 2015]



Carte EBSD d'un échantillon après
déformation [Ben Saada]



Validation statistique de désorientation

Amélioration de la modélisation

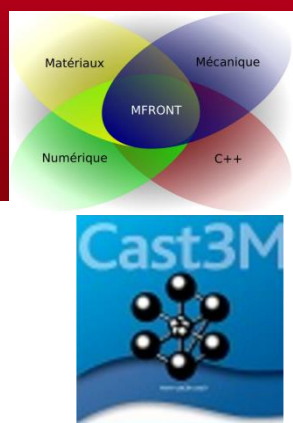
- Nouvelle identification du modèle avec trois familles de systèmes de glissement
- Implémentation en grandes transformations (calcul précis de la rotation intragranulaire)
- Caractérisation de la Matrice d'interactions par Dynamique des Dislocations (→Octobre 2017)
- Nouvelle méthodologie de validation microscopique de l'hétérogénéité des déformations avec la mesure EBSD de la désorientation intragranulaire (→Octobre 2017)

Perspectives

- Prise en compte de l'influence de la taille de grain via les dislocations géométriquement nécessaires (GNDs) (→Octobre 2017)
- Prise en compte des mécanismes de déformation par diffusion de lacunes (Novembre 2017 → Février 2018)

MERCI POUR VOTRE ATTENTION

2. LOI DE COMPORTEMENT DE VISCOPLASTICITÉ CRISTALLINE



Puissance des efforts intérieurs

$$\frac{1}{\rho} \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{L}} = \frac{1}{\rho_0} \underline{\underline{S}} : \underline{\underline{\dot{E}}}_{GL}^e + \frac{1}{\rho_0} \underline{\underline{M}} : \underline{\underline{L}}^p$$

avec :

- $\underline{\underline{S}}$ le second tenseur de Piola-Kirchhoff tenseur des contraintes lagrangien associé aux phénomènes élastiques :

$$\underline{\underline{S}} = \det(\underline{\underline{F}}^e) \underline{\underline{F}}^{e-1} \underline{\underline{\sigma}} \underline{\underline{F}}^{e-T} = \underline{\underline{E}} : \underline{\underline{E}}_{GL}^e$$

- $\underline{\underline{M}}$ le tenseur des contraintes de Mandel associé aux phénomènes plastiques :

$$\underline{\underline{M}} = \det(\underline{\underline{F}}^e) \underline{\underline{F}}^{eT} \underline{\underline{\sigma}} \underline{\underline{F}}^{e-T}$$

- $\underline{\underline{E}}_{GL}^e$ le tenseur des déformations élastique de Green-Lagrange :

$$\underline{\underline{E}}_{GL}^e = \frac{1}{2} (\underline{\underline{F}}^{eT} \cdot \underline{\underline{F}}^e - I)$$

- $\underline{\underline{L}}^p$ le tenseur gradient des vitesses actuelles liées à la plasticité :

$$\underline{\underline{L}}^p = \underline{\underline{\dot{F}}}^p \underline{\underline{F}}^{p-1}$$

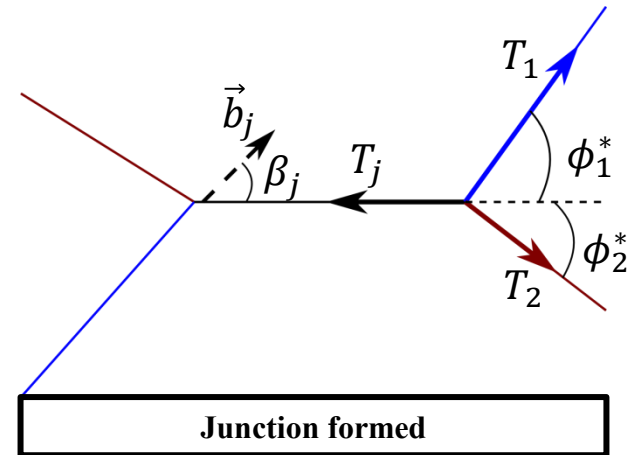
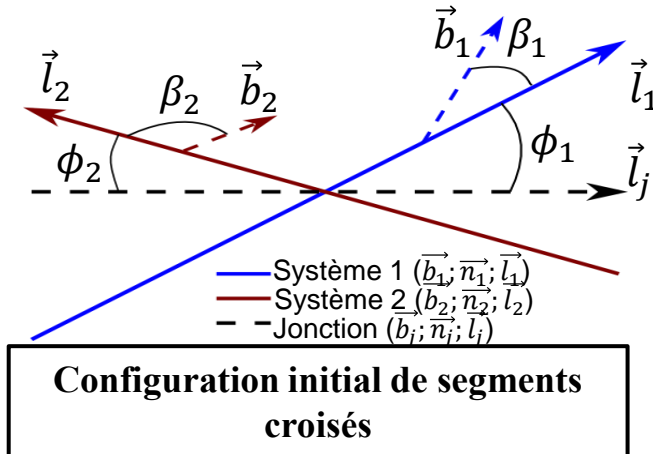
$$\tau_s^f = \mu b \sqrt{\sum_r a^{rs} \rho^r}$$

		Systèmes forêt																									
		Systèmes famille 1 : a/2<110>{100}						Systèmes famille 2 : a/2<110>{110}						Systèmes famille 3 : a/2<110>{111}													
Systèmes mobiles	Systèmes famille 1 : a/2<110>{100}	0	1	2	2	2	2	3	4	5	5	5	5	6	6	7	7	8	9	8	9	8	9	8	9	8	9
		1	0	2	2	2	2	4	3	5	5	5	5	7	7	6	6	9	8	9	8	9	8	9	8	9	8
		2	2	0	1	2	2	5	5	3	4	5	5	9	8	9	8	6	6	7	7	8	9	9	8	9	8
		2	2	1	0	2	2	5	5	4	3	5	5	8	9	8	9	7	7	6	6	9	8	8	9	8	9
		2	2	2	2	0	1	5	5	5	5	3	4	9	8	8	9	8	9	9	8	6	6	7	7	7	7
		2	2	2	2	1	0	5	5	5	5	4	3	8	9	9	8	9	8	8	9	7	7	6	6	6	6
	Systèmes famille 2 : a/2<110>{110}	3	-4	-5	-5	-5	-5	0	10	11	11	11	11	12	12	13	13	14	15	14	15	14	15	14	15	14	15
		-4	3	-5	-5	-5	-5	10	0	11	11	11	11	13	13	12	12	15	14	15	14	15	14	15	14	15	14
		-5	-5	3	-4	-5	-5	11	11	0	10	11	11	15	14	15	14	12	12	13	13	14	15	15	14	15	14
		-5	-5	-4	3	-5	-5	11	11	10	0	11	11	14	15	14	15	13	13	12	12	15	14	14	15	15	14
		-5	-5	-5	-5	3	-4	11	11	11	11	0	10	15	14	14	15	14	15	15	14	12	12	13	13	13	13
	Systèmes famille 3 : a/2<110>{111}	-5	-5	-5	-5	-4	3	11	11	11	11	10	0	14	15	15	14	15	14	14	15	13	13	12	12	12	12
		6	-7	-9	-8	-9	-8	12	-13	-15	-14	-15	-14	0	16	17	17	18	19	20	-18	18	19	20	-18	18	-18
		6	-7	-8	-9	-8	-9	12	-13	-14	-15	-14	-15	16	0	17	17	20	-18	18	19	20	-18	18	19	19	19
		-7	6	-9	-8	-8	-9	-13	12	-15	-14	-14	-15	17	17	0	16	19	18	-18	20	-18	20	19	18	18	18
-7		6	-8	-9	-9	-8	-13	12	-14	-15	-15	-14	17	17	16	0	-18	20	19	18	19	18	-18	18	20	20	
-8		-9	6	-7	-8	-9	-14	-15	12	-13	-14	-15	-18	20	19	18	0	16	17	17	20	-18	19	18	18	18	
-9		-8	6	-7	-9	-8	-15	-14	12	-13	-15	-14	19	18	-18	20	16	0	17	17	18	19	-18	20	20	20	
-8		-9	-7	6	-9	-8	-14	-15	-13	12	-15	-14	20	-18	18	19	17	17	0	16	19	18	20	-18	19	-18	
-9		-8	-7	6	-8	-9	-15	-14	-13	12	-14	-15	18	19	20	-18	17	17	16	0	-18	20	18	19	19	19	
-8		-9	-8	-9	6	-7	-14	-15	-14	-15	12	-13	-18	20	18	19	20	-18	19	18	0	16	17	17	17	17	
-9		-8	-9	-8	6	-7	-15	-14	-15	-14	12	-13	19	18	20	-18	18	19	-18	20	16	0	17	17	17	17	
-8		-9	-9	-8	-7	6	-14	-15	-15	-14	-13	12	20	-18	19	18	19	18	20	-18	17	17	0	16	16	16	
-9		-8	-8	-9	-7	6	-15	-14	-14	-15	-13	12	18	19	-18	20	-18	20	18	19	17	17	16	16	16	16	

n° inter	β_j	β_1	β_2	β_{12}	
0	0	0	0	0	Auto-écrouissage
1	Dipolaire	0	0	0	Inter
2	90	45	45	90	{100}/{100}
3	Annihilation	0	0	90	Inter
4	45	90	0	90	{100}/{110}
5	45	45	90	45	
6	Annihilation	0	0	54.74	Inter
7	45	90	0	54.74	{100}/{111}
8	60	90	60	54.74	
9	60	0	60	54.74	
10	90	90	90	90	Inter
11	90	35.26	35.26	60	{110}/{110}
12	Annihilation	0	0	35.26	Inter
13	65.91	54.74	90	90	{110}/{111}
14	73.22	54.74	30	90	
15	60	0	60	35.26	
16	Annihilation	0	0	70.53	Inter
17	45	60	60	70.53	{111}/{111}
18	60	60	0	70.53	
19	Dipolaire	0	0	0	
20	90	60	60	70.53	

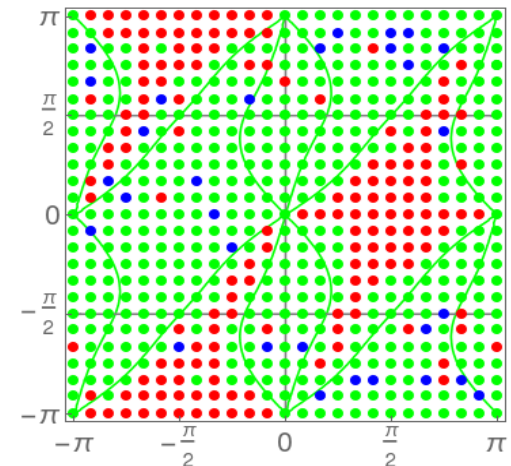
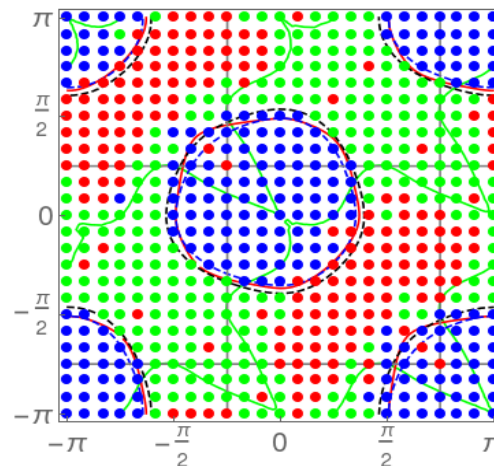
3. MODÉLISATION MONO- CRISTALLINE

3.3. Matrice d'interactions

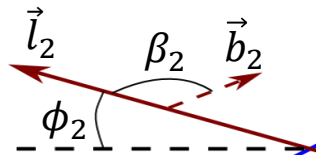


Kind of junctions:

- $a/2 \langle 110 \rangle 100$
- $a/2 \langle 110 \rangle 110$
- $a/2 \langle 110 \rangle 111$
- $a/2 \langle 110 \rangle 112$
- $a/2 \langle 110 \rangle 113$
- $a/2 \langle 200 \rangle 100$
- $a/2 \langle 200 \rangle 012$



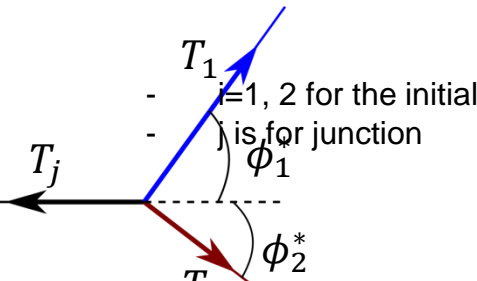
Line energy:



$$E_i = \frac{l\mu_i b^2}{4\pi} \frac{(1 - \nu_i \cos^2(\beta_i))}{1 - \nu_i} \ln \frac{R}{r_0}$$

ic approximation, ν_i and μ_i are the same whatever is the kind of system
 - - - Jonction ($b_i; \vec{n}_i; l_i$)

**Configuration initial de segments
croisés**



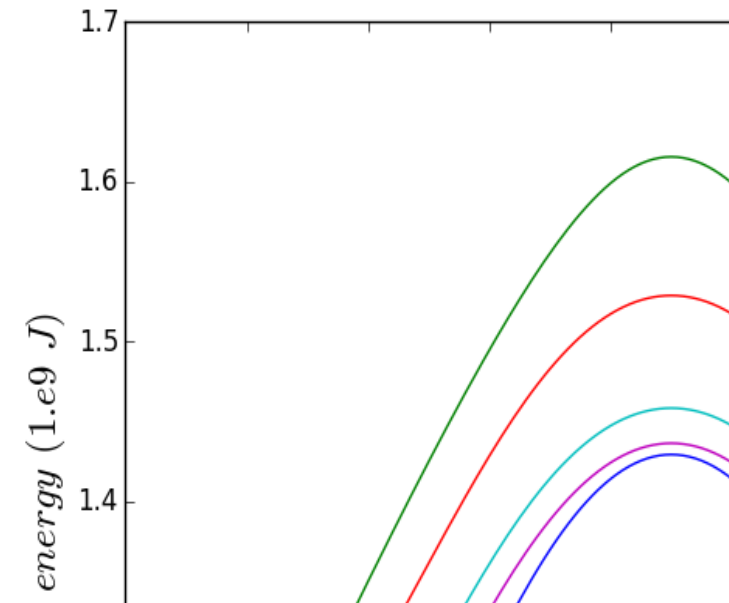
- In full anisotropic calculations we use anisotropic using DisDi (Joël DOUIN)

Junction formed

Kind of junctions:
 e Bacon - Scattergood approximation, the anisotropic energies for
 and edge dislocations are used to obtain a value for ν_i and μ_i :

$$\frac{a/2 \langle 110 \rangle \langle 110 \rangle}{E_{edge_i}} ; \quad \mu_i = \frac{4\pi E_{screw_i}}{b^2}$$

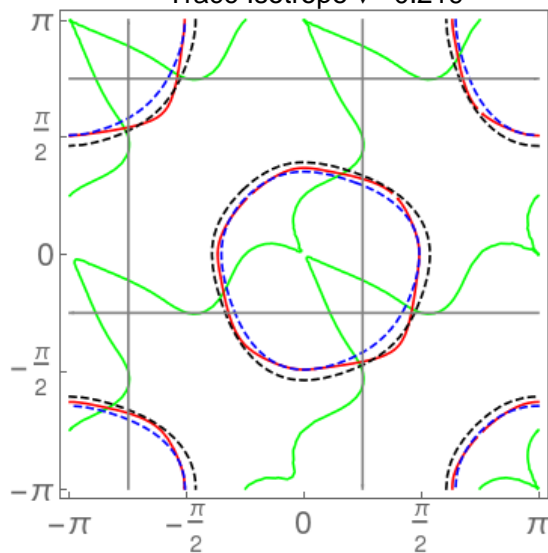
$a/2 \langle 110 \rangle \langle 111 \rangle$
 $a/2 \langle 110 \rangle \langle 112 \rangle$
 $a/2 \langle 110 \rangle \langle 113 \rangle$
 $a/2 \langle 200 \rangle \langle 100 \rangle$
 $a/2 \langle 200 \rangle \langle 012 \rangle$



Système	Système 1	Système 2	Jonction
Numéro de système	1 (1)	3 (17)	11
Type	{100}	{100}	{110}
(n)[b]	a/2[011] (100)	a/2 [101] (010)	a/2[1-10] (-1-10)
ν	0.219	0.219	0.309
μ (GPa)	70.17	70.17	70.17

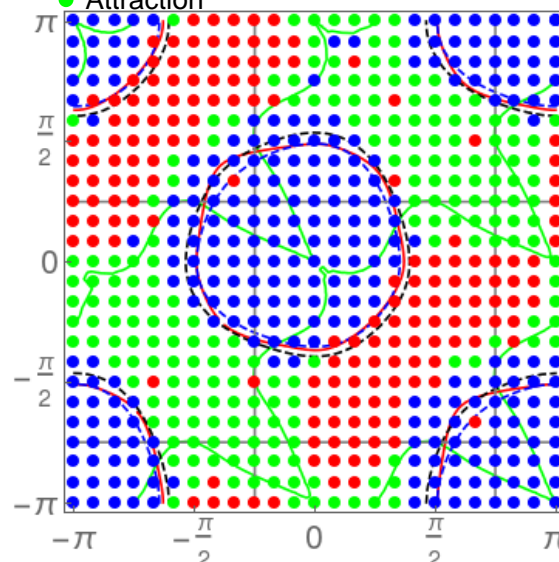
--- Tracé Bacon & Wattergood
 --- Tracé Anisotrope
 --- Tracé Isotrope $\nu = 0.219$

• Jonction formée
 • Répulsion
 • Attraction

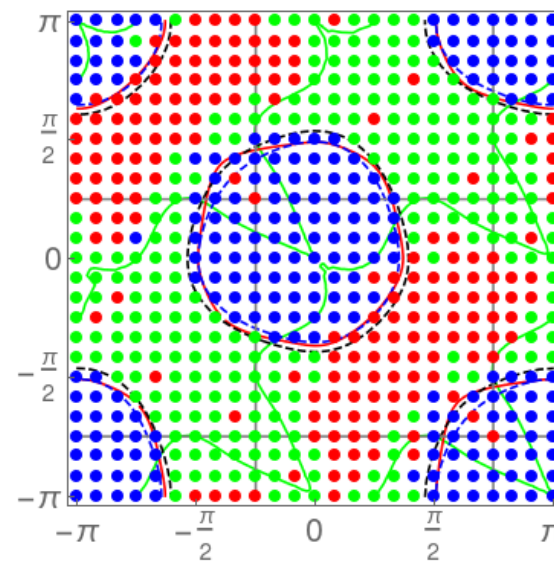


JOURNÉE UTILISATEURS MFRONT

Tracés analytiques



LUC PORTELETTE
Tracés analytiques + simulation
DD Isotrope

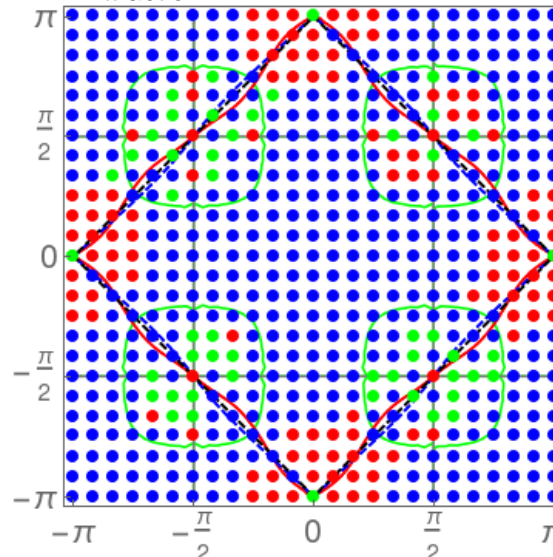
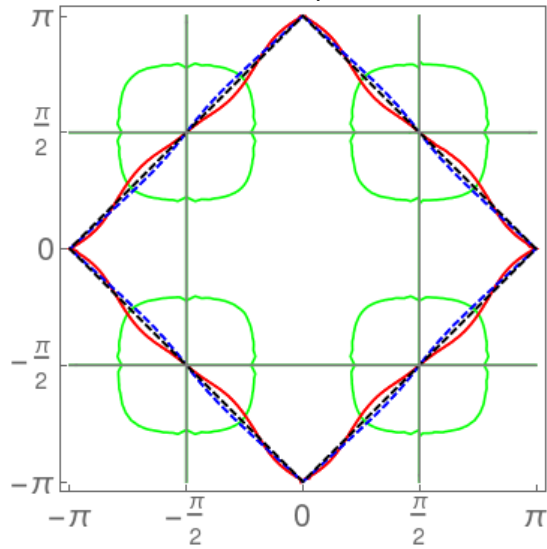


Saclay | 30 Mai 2017
Tracés analytiques + simulation
DD Anisotrope | PAGE 21

Système	Système 1	Système 2	Annihilation
Numero de système	1 (1)	7 (49)	-
Type	{100}	{110}	-
(n)[b]	a/2[011](100)	a/2[011](0-11)	-
ν	0.219	0.310	-
μ (GPa)	70.17	70.17	-

--- Tracé Baer et Wattergood
 --- Tracé Anisotrope
 --- Tracé Isotrope $\nu=0.264$

• Fonction formée
 • Répulsion
 • Attraction



JOURNÉE UTILISATEURS MFRONT

LUC PORTELETTE

Tracés analytiques

Tracés analytiques + simulation
DD Isotrope

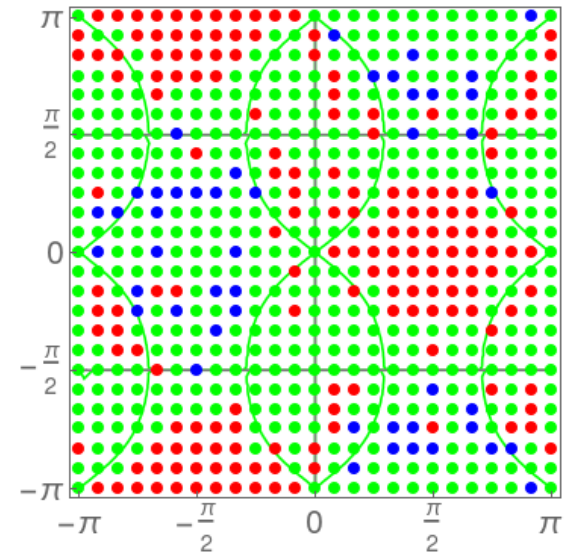
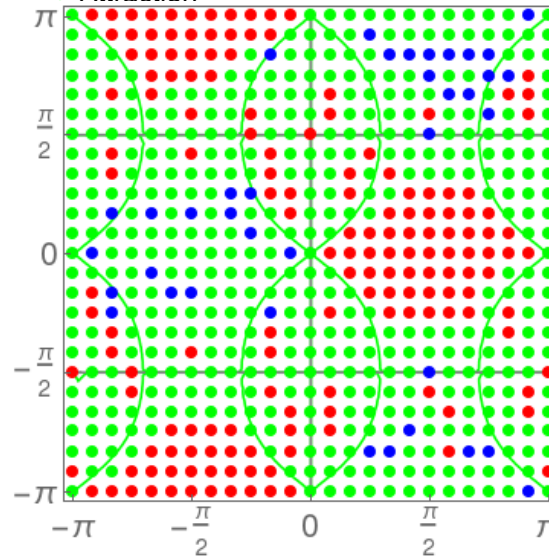
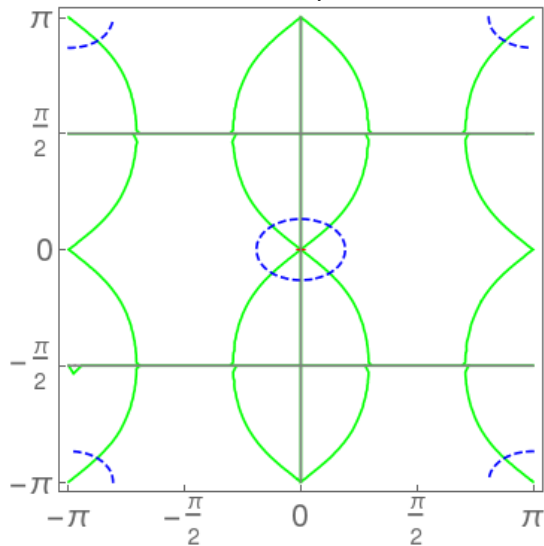
Saclay | 30 Mai 2017

| PAGE 22

Système	Système 1	Système 2	Jonction
Numéro de système	1 (1)	8 (61)	25
Type	{100}	{110}	{100} Hirth
(n)[b]	$a/2[011]$ (100)	$a/2[01-1]$ (011)	$a/2[020]$ (100)
ν	0.219	0.309	0.528
μ (GPa)	70.17	70.17	47.87

--- Tracé Bacon & Wattergood
 --- Tracé Anisotrope
 --- Tracé Isotrope $\nu=0.264$

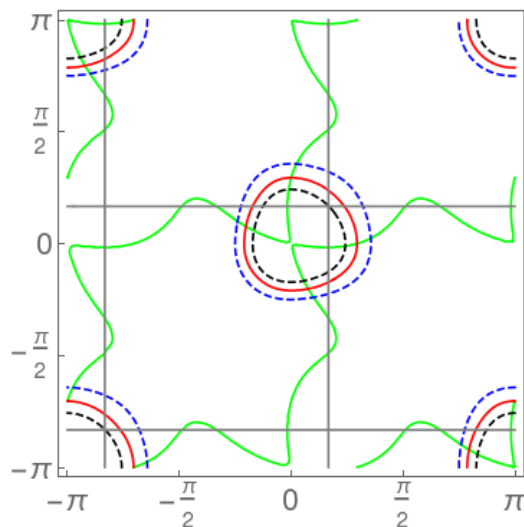
● Jonction formée
 ● Répulsion
 ● Attraction



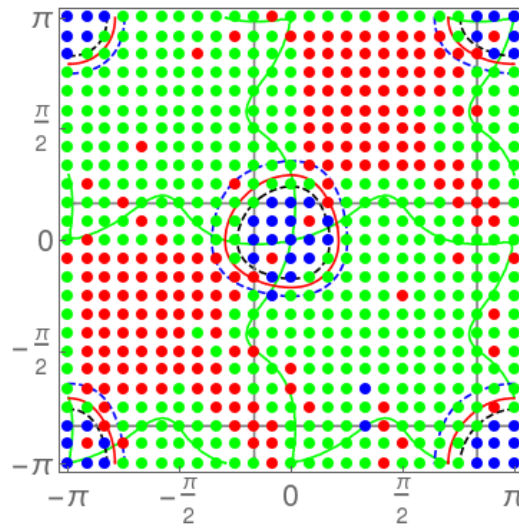
Système	Système 1	Système 2	Jonction
Numéro de système	13 (121)	15 (145)	26
Type	{111}	{111}	{100}Hirth
(n)[b]	$a/2[011](11-1)$	$a/2[011](1-11)$	$a/2[002](010)$
ν	0.270	0.270	0.528
μ (GPa)	70.17	70.17	47.87

--- Tracé Baer & Eshelby
 --- Tracé Anisotrope
 --- Tracé Isotrope $\nu = 0.270$

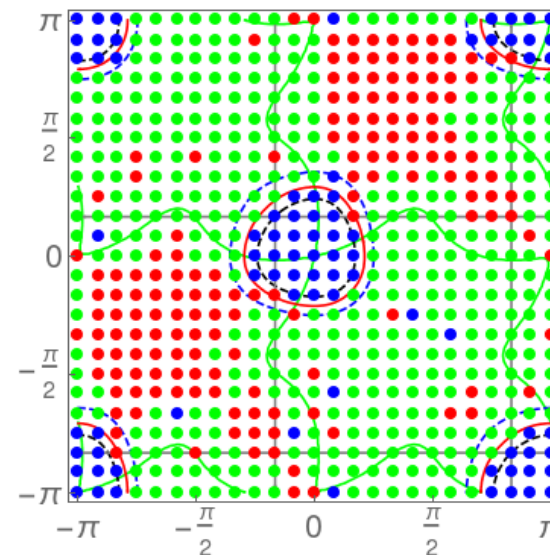
• Jonction formée
 • Répulsion
 • Attraction



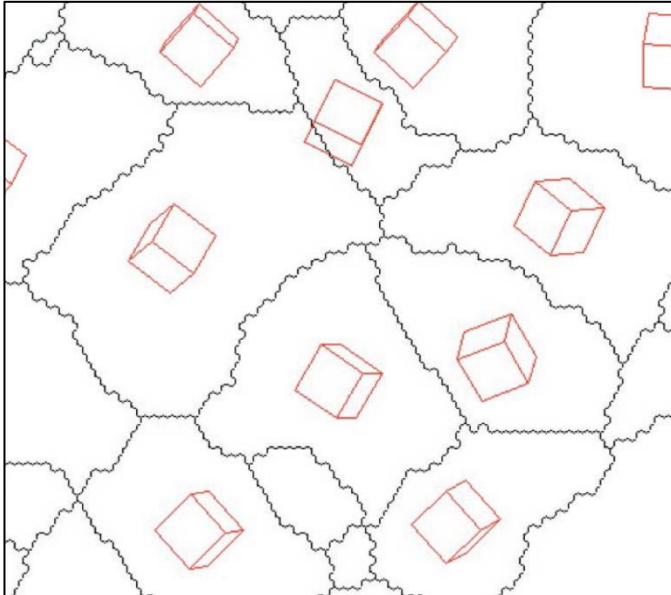
Tracés analytiques



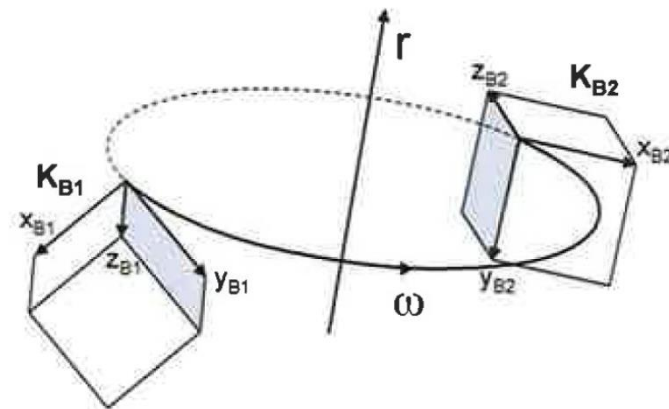
Tracés analytiques + simulation
DD Iso



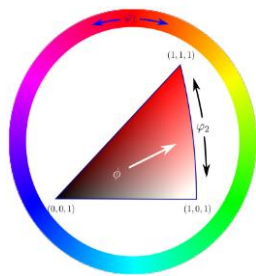
Tracés analytiques + simulation
DD Aniso



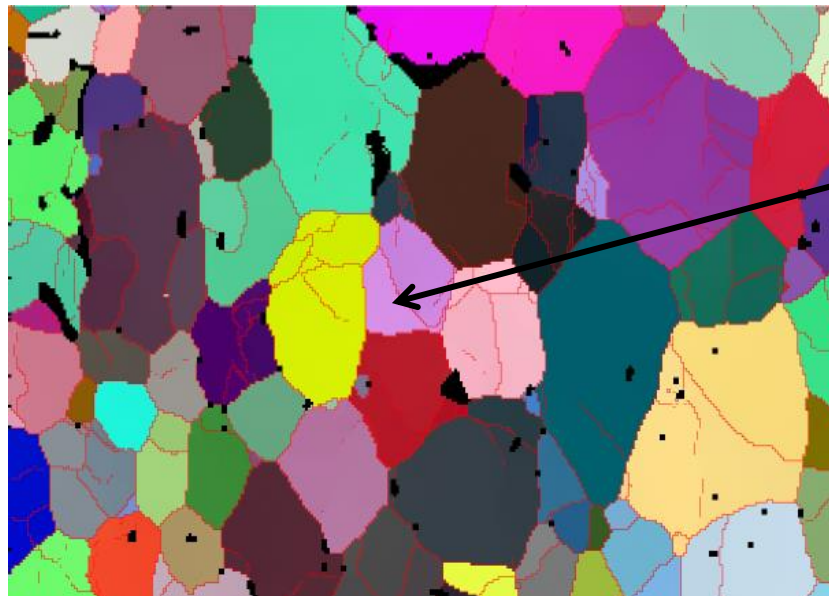
Chaque grain a une orientation
cristalline



Une désorientation c'est l'angle ω qui
permet de passer d'un repère K_{B1} à un
repère K_{B2} en le faisant tourner autour
d'un axe \vec{r}



Coloration
RGB
[Ibrahim 2015]



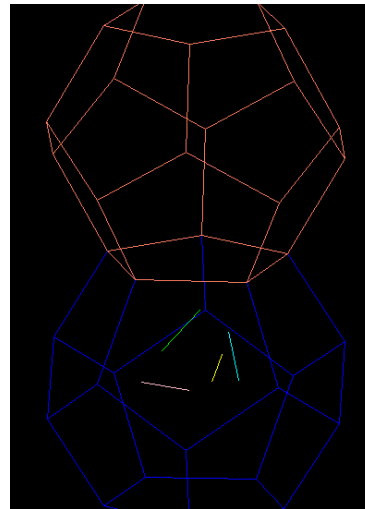
Carte EBSD d'un échantillon déformé
[Ben Saada]

Dans un grain donnée on calcul son orientation moyenne. On calcul la désorientation entre l'orientation de chaque pixel de ce grain avec son orientation moyenne et on en déduit un écart type de désorientation dans le grain.

En calculant cet écart type dans chaque grain on peut en déduire une répartition des écart type de désorientation en fonction du nombre de grain

Effet Hall-Petch « smaller is stronger »

- Plus les grains sont petit plus le matériaux sera difficile à déformer
- On considère que les dislocations sont globalement bloqué par les joints de grains.
- Il y a donc présence d'un plus grand nombre de dislocations dans le matériaux
- Ces dislocations gênent le mouvement des dislocations mobiles et induisent un durcissement
- On appelle ces dislocations GNDs pour Geometrically Necessary Dislocations

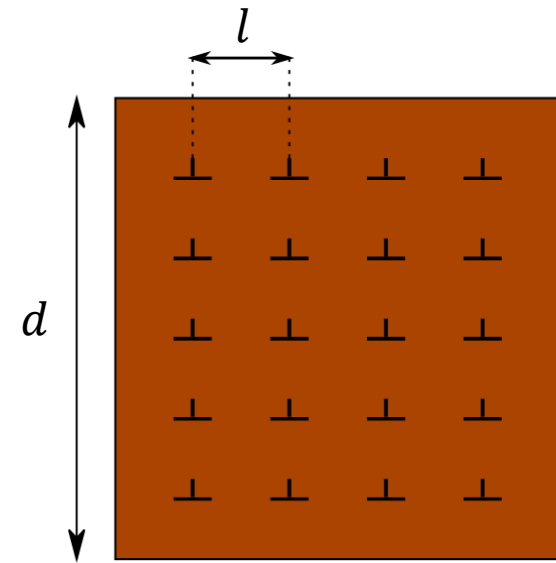


Blocage des dislocations aux joints de grain

Effet de la taille de grain

- Objectif : Intégrer à la loi de comportement l'effet de la taille de grain à l'aide des dislocations géométriquement nécessaires (GNDs)
- Effet Hall-Petch : lorsque la taille de grain diminue, la contrainte d'écoulement augmente
- Illustration de la densité de dislocation dans un cristal (dislocations équi-réparties)

$$\rho = \frac{n \cdot d}{d^3} = \frac{n}{d^2} = \frac{1}{l^2}$$



Effet de la taille de grain

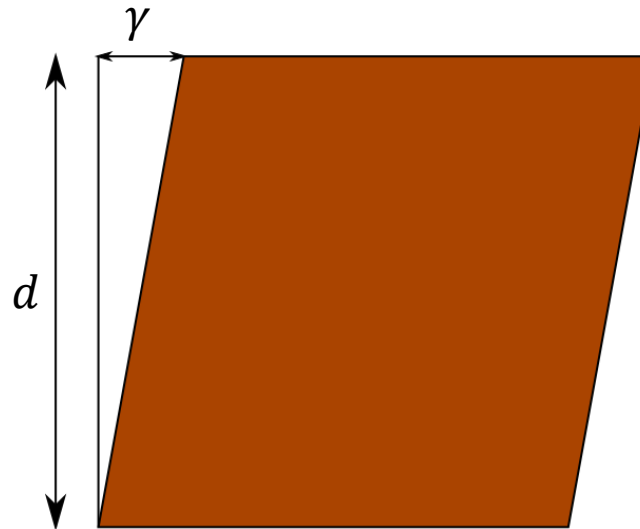
■ Cisaillement d'un grain cubique de côté d

■ n dislocations traversant le grain faisant une marche de longueur b en surface :

■ $\gamma = \frac{n \cdot b}{d}$

■ La densité de dislocations ayant traversées le grain en fonction du cisaillement est :

■ $\rho = \frac{\gamma}{d \cdot b}$



Effet de la taille de grain

■ Cisaillement d'un grain cubique avec joint de grain

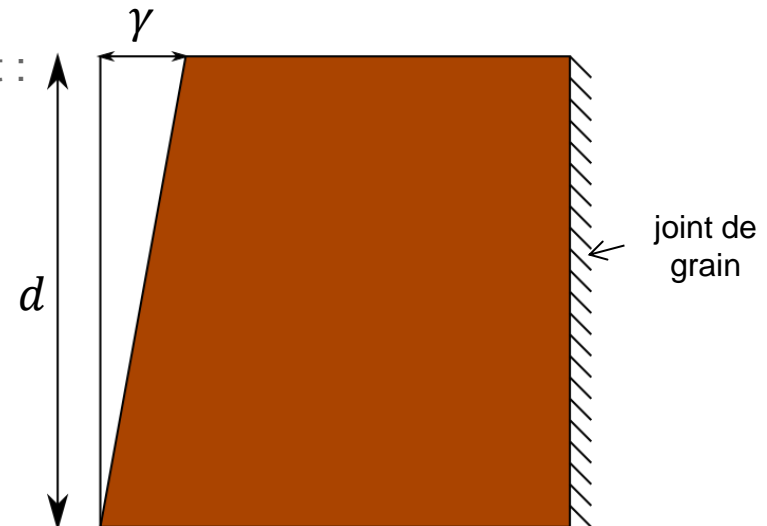
- Lorsqu'il y a un joint de grain, les dislocations ne peuvent pas le traverser ce dernier. Ces dislocations présentes dans le grain s'appellent des dislocations géométriquement nécessaires (GNDs)
- n dislocations géométriquement nécessaires présentent dans le matériaux

$$\gamma = \frac{n \cdot b}{d}$$

■ La densité de GNDs contenues dans le grain est :

$$\rho_{GND} = \frac{\gamma}{d \cdot b}$$

Remarque : plus d est petit et plus ρ_{GND} est grand qui engendre plus de durcissement



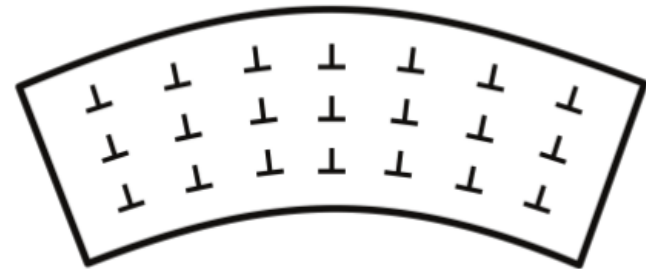
Calcul des GNDs

- La présence de dislocations géométriquement nécessaires induit une variation de l'orientation cristalline \Rightarrow courbure du réseau cristallin
- Courbure du réseau défini par le tenseur de Nye $\underline{\underline{\alpha}}$:

$$\alpha_{ij} = \frac{\partial \theta_i}{\partial x_j} - \delta_{ij} \frac{\partial \theta_i}{\partial x_j}$$

- Calcul des courbures par système α_s :

$$\alpha_s = \sqrt{(\underline{\underline{\alpha}} \cdot \vec{n})(\underline{\underline{\alpha}} \cdot \vec{n})}$$



Présence de dislocation dans le réseau
induit une rotation

- Calcul de la densité de dislocation à partir de la courbure :

$$\rho_{GND_s} = \frac{\alpha_s}{b}$$

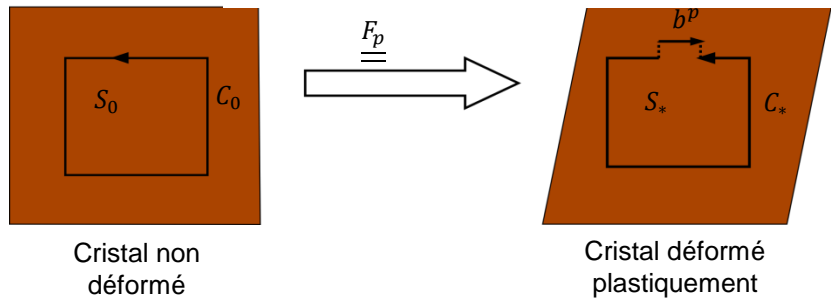
Calcul des GNDs

- Estimer la quantité des GNDs en fonction de l'incompatibilité associée à la plasticité
- Qu'est-ce que l'incompatibilité ?

■ \vec{b}^p est l'incompatibilité cumulée pour la surface S de normale \vec{ds} entourée du contour C

■ $\vec{b}^p = \int_{C_*} \underline{\underline{F_p}} dx_0$

Théorème de
Stokes



Calcul des GNDs

- Tenseur de Nye en fonction de l'incompatibilité :

$$\underline{\underline{\alpha}} = \underline{\underline{rot}} \left(\underline{\underline{F_e}}^{-1} \right)^T$$

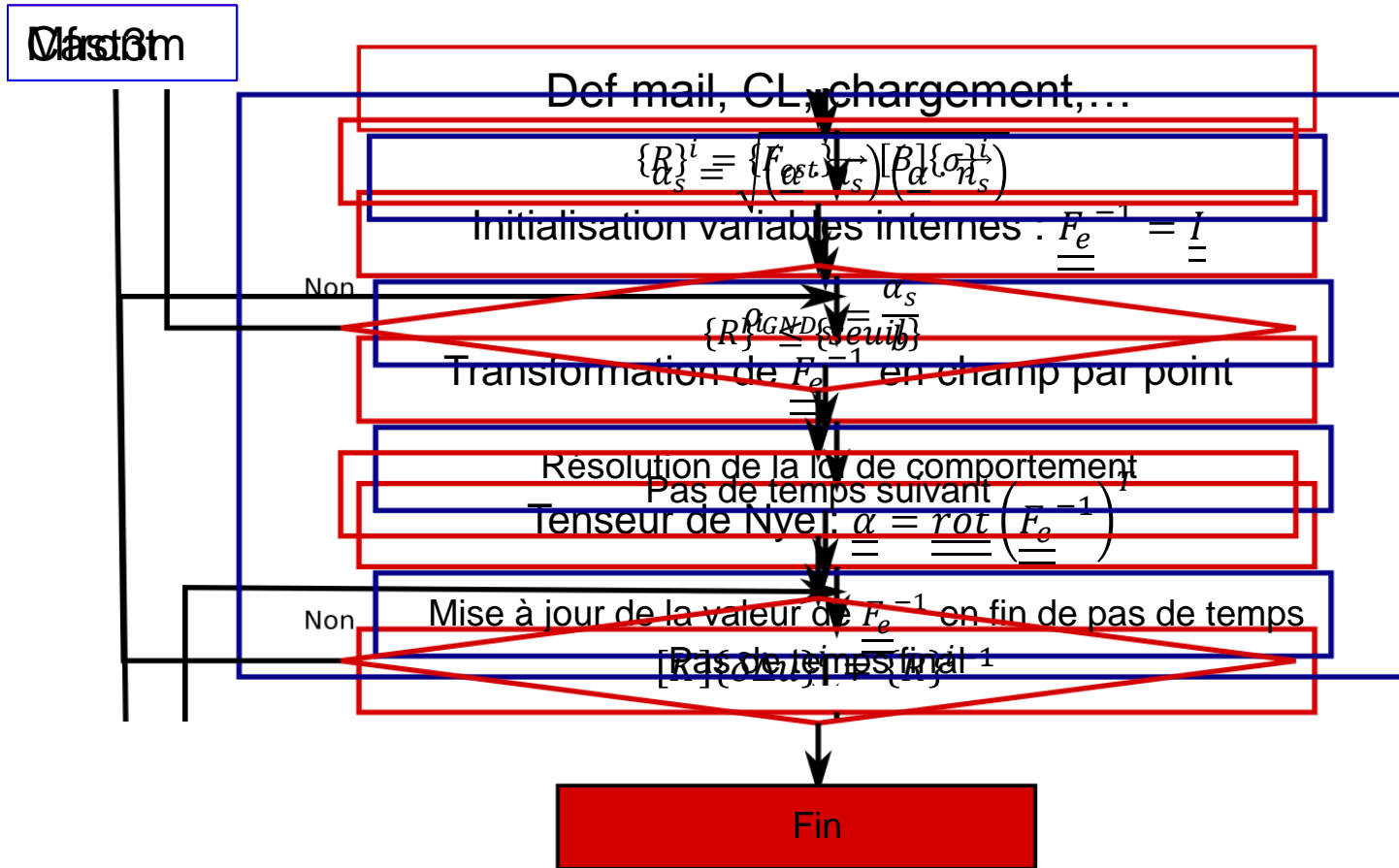
- Pour chaque système de glissement :

$$\alpha_s = \sqrt{\left(\underline{\underline{\alpha}} \cdot \vec{n_s} \right) \left(\underline{\underline{\alpha}} \cdot \vec{n_s} \right)}$$

- Densité de GNDs :

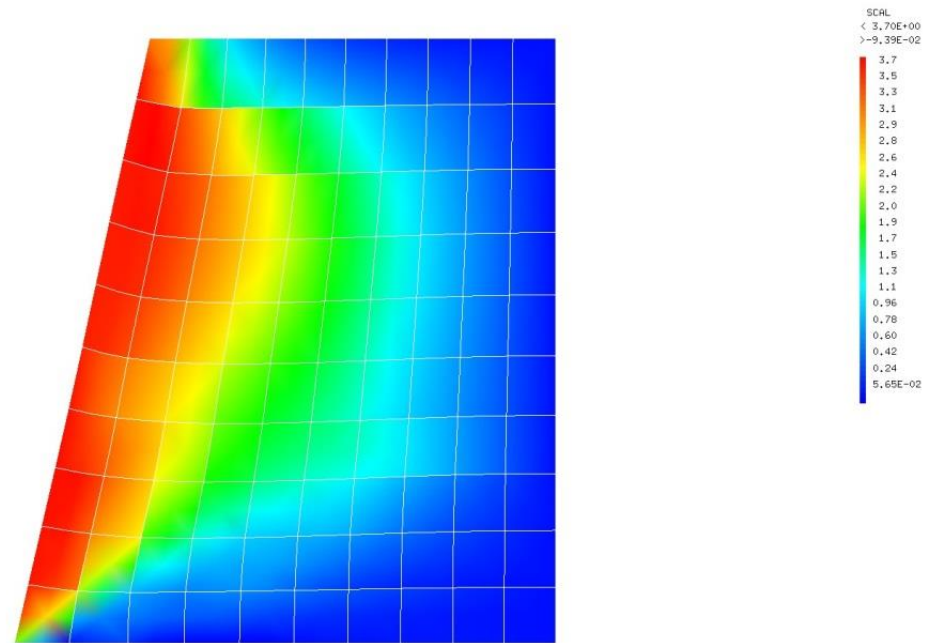
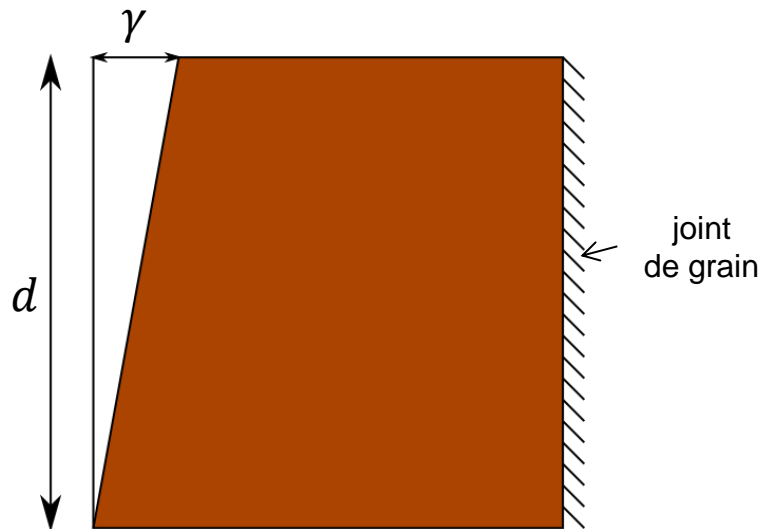
$$\rho_{GND_s} = \frac{\alpha_s}{b}$$

Implémentation des GNDs dans le modèle éléments finis



Cas test

- S'assurer que l'on a bien la bonne dépendance à la taille de grain
- S'assurer que l'on obtient la bonne valeur de ρ_{GND}



Conclusions sur l'étude monocristalline

- Résultats macroscopique permettant de retracer l'anisotropie avec les 3 familles de glissement
- Pas de prise en compte d'interactions entre les systèmes de la famille 1 et ceux de la famille 3
- Prise en compte de la rotation du réseau cristallin

Perspectives sur l'étude monocristalline

- Étude de la contribution de chaque famille pour déterminer leur CRSS respectives
- Étude de la matrice d'interaction à l'aide de la dynamique des dislocations
- Étude de la sensibilité sur polycristaux pour d'éventuelles simplifications