

Lars Olovsson, Mattias Unosson  
**KRYP, ett Finita Elementprogram för Kristallplasticitet**

TOTALFÖRSVARETS FORSKNING SINSTITUT

Vapen och skydd

147 25 Tumba

FOI-R--0551--SE

September 2002

ISSN 1650-1942

**Metodrapport**

Lars Olovsson, Mattias Unosson

# KRYP, ett Finita Element Program för Kristallplasticitet

<b>Utgivare</b> Totalförsvarets Forskningsinstitut - FOI Vapen och skydd 147 25 Tumba	<b>Rapportnummer, ISRN</b> FOI-R--0551--SE	<b>Klassificering</b> Metodrapport
	<b>Forskningsområde</b> 5. Bekämpning	
	<b>Månad, år</b> September 2002	<b>Projektnummer</b> E2022
	<b>Verksamhetsgren</b> 5. Uppdragsfinansierad verksamhet	
	<b>Delområde</b> 51 VVS med styrda vapen	
<b>Författare/redaktör</b> Lars Olovsson Mattias Unosson	<b>Projektledare</b> Ewa Lidén	
	<b>Godkänd av</b>	
	<b>Uppdragsgivare/kundbeteckning</b>	
	<b>Tekniskt och/eller vetenskapligt ansvarig</b>	
<b>Rapportens titel</b> KRYP, ett Finita Element Program för Kristallplastcitet		
<b>Sammanfattning (högst 200 ord)</b> KRYP är ett finita elementverktyg för kristallplasticitetsberäkningar. Teorin är baserad på kontinuumsmekanik där dislokationer beskrivs med fältvariabler.  Inom ramen för projektet Lätta skydd har KRYP gjorts mer användarvänligt. Dessutom har ny funktionalitet lagts in i programmet.		
<b>Nyckelord</b> kristallplasticitet, finita elementmetoden, egenutvecklad mjukvara		
<b>Övriga bibliografiska uppgifter</b>	<b>Språk</b> Svenska	
<b>ISSN</b> 1650-1942	<b>Antal sidor:</b> 17 s.	
<b>Distribution enligt missiv</b>	<b>Pris:</b> Enligt prislista	

<b>Issuing organization</b> FOI – Swedish Defence Research Agency Weapons and Protection SE-147 25 Tumba	<b>Report number, ISRN</b> FOI-R--0551--SE	<b>Report type</b> Methodology report
	<b>Research area code</b> 5. Combat	
	<b>Month year</b> September 2002	<b>Project no.</b> E2022
	<b>Customers code</b> 5. Commissioned Research	
	<b>Sub area code</b> 51 Weapons and Protection	
<b>Author/s (editor/s)</b> Lars Olovsson Mattias Unosson	<b>Project manager</b>	
	<b>Approved by</b>	
	<b>Sponsoring agency</b>	
	<b>Scientifically and technically responsible</b>	
<b>Report title (In translation)</b> KRYP, a Finite Element Program for Crystal Plasticity		
<b>Abstract (not more than 200 words)</b> KRYP is a finite element program for crystal plasticity simulations. The theory is based on a continuum mechanical approach where dislocations are treated as field variables.  During this project, KRYP has been made more user friendly. In addition, new functionalities have been added to the code.		
<b>Keywords</b> crystal plasticity, finite element method, in-house software		
<b>Further bibliographic information</b>	<b>Language</b> Swedish	
<b>ISSN</b> 1650-1942	<b>Pages</b> 17 p.	
<b>Price acc. to pricelist</b>		

**Innehållsförteckning**

<b>1</b>	<b>Introduktion</b> .....	<b>2</b>
<b>2</b>	<b>Metod</b> .....	<b>2</b>
2.1	Teori .....	2
2.2	Implementering .....	3
2.3	Förbättringar .....	3
<b>3</b>	<b>Mikrospänningar i aluminium</b> .....	<b>3</b>
3.1	Sträckning av aluminiumprofil.....	4
<b>4</b>	<b>Diskussion</b> .....	<b>6</b>
	<b>Appendix A</b> .....	<b>7</b>

## 1 Introduktion

KRYP är ett numeriskt beräkningsverktyg för kristallplasticitet som utvecklats inom ramarna för projekten *Gradient- och Matrismaterial* och *Lätta Skydd*. Syftet med KRYP är att, genom datorsimuleringar, kunna förstå och förutspå hur olika kornstorlekar och korngeometrier påverkar en metallegerings makroskopiska beteende och hållfasthet.

Teorin i KRYP är helt baserad på kontinuumsmekanic, där dislokationer (defekter) i materialet beskrivs med fältvariabler. Plastiska deformationer antas uppstå när dislokationer vandrar genom kristallstrukturen.

De styrande ekvationerna löses numeriskt med finita elementteknik. En typisk modell innehåller mellan 1 och  $10^4$  korn, där varje korn modelleras med mellan 1 och  $10^4$  element.

Den materialvolym som modelleras utsätts för en viss belastning. Materialets respons i form av korndeformationer och dislokationsflöden registreras och lagras i en utdatafil.

Förhoppningen är att, genom analys och visualisering av informationen i utdatafilen, nå en ökad insikt om materialets egenskaper.

KRYP är skrivet i Fortran 90 och består idag av drygt 5000 rader programkod.

## 2 Metod

För en noggrannare genomgång av teori och numerisk implementering hänvisas till FOI-R—0374—SE. Vi kommer här endast, punktvis, snabbt nämna några intressanta grundläggande antaganden.

### 2.1 Teori

- Materialens elastiska egenskaper är isotropa och linjära.
- Plastisk glidning sker i vissa glidplan i kristallen, för en FCC-metall i de s.k.  $\{1\ 1\ 1\}$ -planen.
- Dislokationerna delas upp i två huvudgrupper, mobila och immobila. De mobila dislokationerna underlättar plastisk deformation. Immobila dislokationer försvårar plastiska deformationer genom att låsa upp andra dislokationer.
- Dislokationstätheterna beskrivs med fältvariabler.
- Dislokationer nyskapas, immobiliseras och remobiliseras i processer som drivs av plastiskt flöde i materialet.
- Den skjuvspänning som krävs för att aktivera ett visst glidplan är en funktion av lokala värden hos de olika dislokationsfälten.

## 2.2 Implementering

- KRYP är en finita elementprogramvara.
- Den geometri som skall analyseras diskretiseras med tri-linjära 8-nodiga finita element.
- KRYP arbetar med explicit tidsintegrering.
- Indata genereras i ett s.k. keywordformat. En indatafil innehåller nodkoordinater, elementdefinitioner, randvillkor, materialdata, samt information om önskad utdata och beräkningstid. Se keywordmanual i Appendix A.

## 2.3 Förbättringar

Utvecklingen av KRYP startade som ett delprojekt i *Matris- och Gradientmaterial*. Under *Lätta Skydd* har programvaran förbättrats och vissa tillägg har gjorts:

- Ett flertal programkodsbuggar har eliminerats.
- Resultatfilerna har anpassats för inläsning i LS-POST, ett kommersiellt visualiseringsverktyg.
- En rutin för automatisk tidstegsberäkning har implementerats.
- Artificiell dämpning har lagts till för att möjliggöra studier av restspänningar.
- Det går nu att skapa stokastiska skadefördelningar i materialet. Detta möjliggör en mer verklighetstrogen respons vid sprickbildning och brott.
- En starkt förbättrad kristallriktningskontroll har utvecklats och implementerats. Den metod som beskrivs i rapporten FOI-R—0374—SE har stora brister.
- Vi har skrivit en kortfattad keywordmanual (ett hjälpmedel för indatagenerering), se Appendix A.

## 3 Mikrospänningar i aluminium

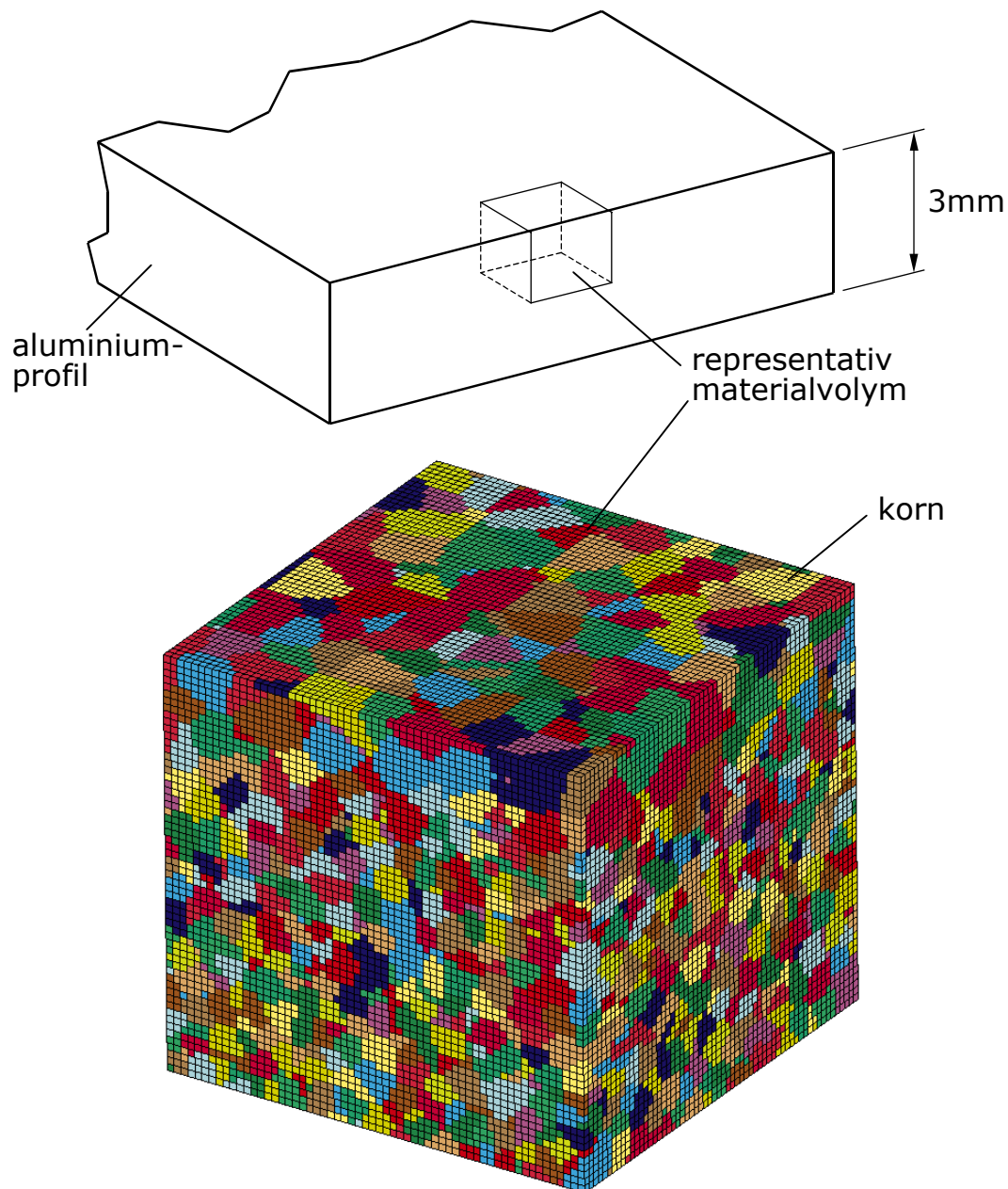
Utvecklingen av KRYP har nått ett läge där kristallplastiska antaganden och teorier bör testas mot experimentella data. Tyvärr har nödvändiga experimentella resultat för detta arbete ännu inte frambringats.

Nedanstående prediktering av mikrospänningar i aluminium visar därför inte huruvida KRYP fungerar som simuleringsverktyg eller inte. Simuleringarna bör endast ses som ett försök att illustrera ett, för KRYP, möjligt applikationsområde.

### 3.1 Sträckning av aluminiumprofil

SAPA i Finspång dragtestar extruderade aluminiumprofiler för att undersöka produkters mekaniska egenskaper. Vi har försökt att, med KRYP, beskriva en representativ volym av en viss profil. Syftet var att studera mikrorestspänningarna i materialet efter avlastning.

Den representativa volymen är en kub med sidlängden 1.5mm, som består av 5000 korn med slumpmässiga kristallriktningar. Volymen är indelad i 216000 finita element, se Figur 1.

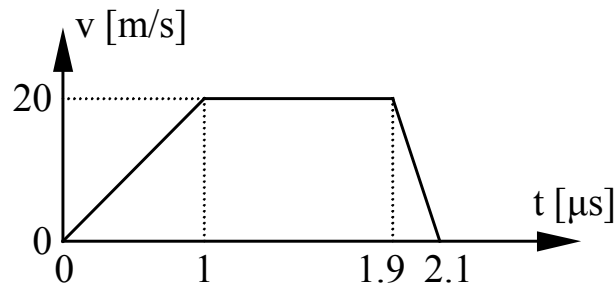


**Figur 1:** Aluminiumprofil och representativ materialvolym.



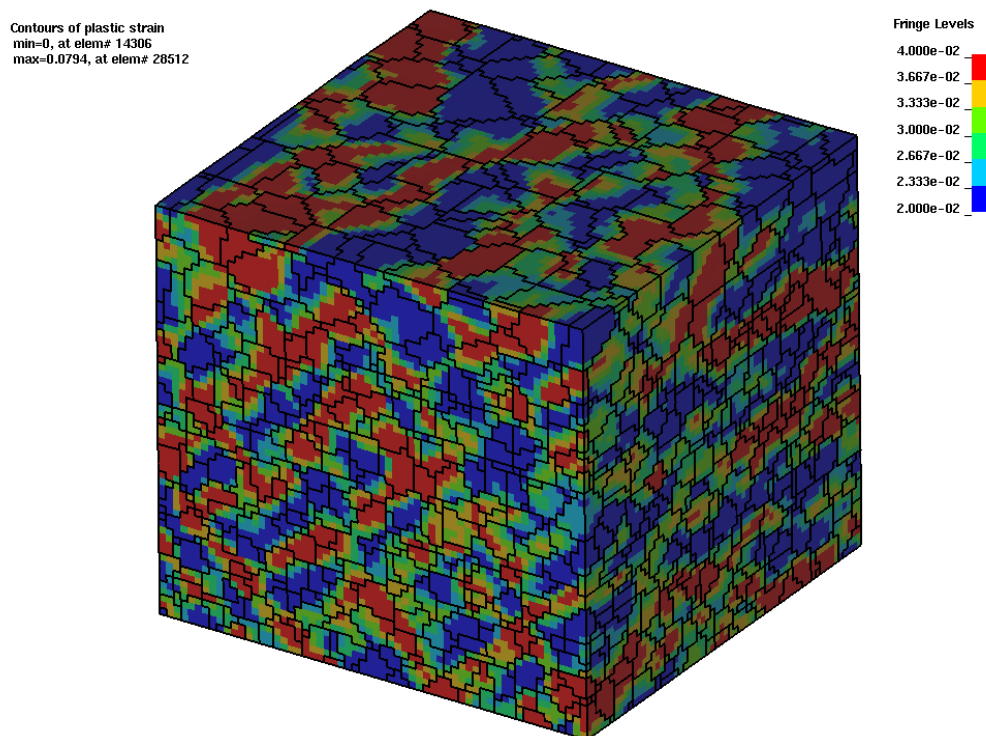
Enklast möjliga materialmodell valdes. Glidplanens aktiveringsspänning sattes till ett konstant värde  $\tau_y=40\text{MPa}$ .

Kuben sträcktes med en föreskriven hastighet,  $v(t)$ , under  $2.1\mu\text{s}$ . Därefter släpptes den fri, samtidigt som rörelseenergin successivt dämpades bort från systemet.



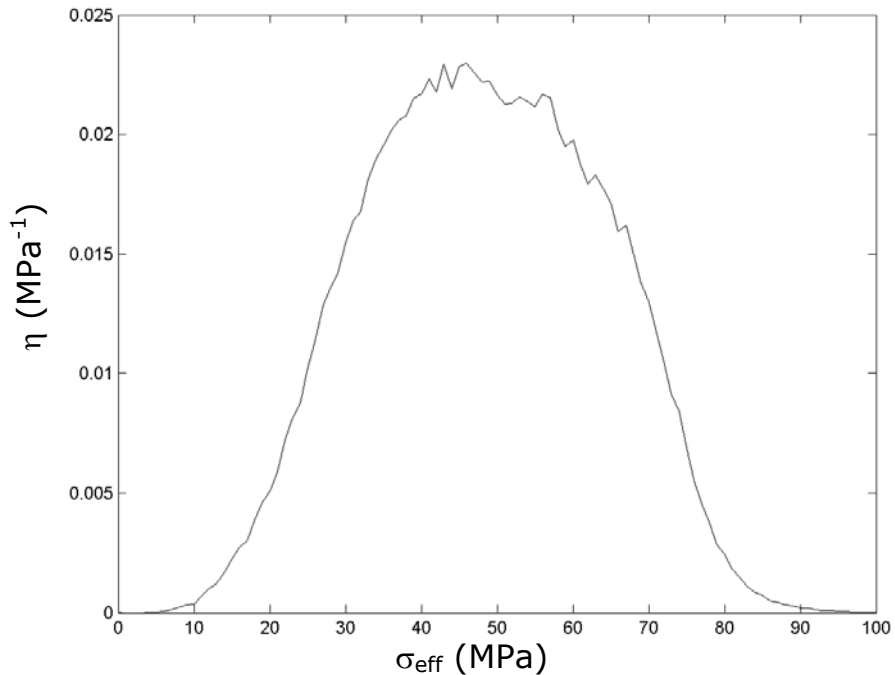
**Figur 2:** Sträckningshastighet av den representativa materialkuben.

Figur 3 visar effektiv plastisk töjning i provkroppen efter avslutad beräkning. Observera antydning till utvecklande av lokala skjuvband.



**Figur 3:** Effektiv plastisk töjningsfördelning i provkroppen.

Kurvan i Figur 4 visar hur de beräknade restspänningarna varierar i provkroppen.  $\eta$  visar volymsandel material per MPa restspänning och  $\sigma_{\text{eff}}$  är von Mises effektivspänning. Ytan under kurvan är 1. Resultatet pekar på stora lokala spänningar, något som skulle vara intressant att verifiera genom röntgendifraktionsmätningar av det verkliga materialet. En spontan reaktion är dock att restspänningarna verkar för höga.



**Figur 4:** Fördelning av effektivspänning i provkroppen efter avlastning.

## 4 Diskussion

Utvecklingen av KRYP har drivits fram av behovet att bättre förstå hur olika kornstrukturer styr materials mekaniska egenskaper. KRYP kräver indata i form av kända mikromekaniska egenskaper. Vi har alltså inte helt lyckats skaka av oss alla kopplingar till den experimentella världen.

Ett stort utvärderingsarbete är ett nödvändigt nästa steg. KRYP's grundläggande kristallplastiska antaganden har ännu inte verifierats mot verkliga data.

## Appendix A

### Keywordmanual för KRYP

#### List of commands

*CONTACT	Contact definitions
*DEFINE_CURVE	Curve definitions
*DEFINE_PRIMITIVE	Simple geometry definitions for contact definitions
*ELEMENT_SOLID	Solid element definitions
*HISTORY_ELEMENT	List of elements who's history variables are to be output more frequently
*HISTORY_NODE	List of nodes who's coordinates and velocities are to be output more frequently
*INITIAL_ORIENTATION	Initial crystal orientation
*INITIAL_VELOCITY	Initial node velocities
*MAT	Material data
*NODE	Node definitions and their BC's
*PART	Part definitions
*PRESCRIBED_MOTION	Define prescribed motions of sets of nodes
*SET_NODE	Node set definitions
*SET_SEGMENT	Segment set definitions
*STOCHASTIC_DAMAGE	Initial stochastic distribution of defects
*STOCHASTIC_DISTRIBUTION	Initial stochastic distribution of history variables (smoother distribution than what is obtained with *STOCHASTIC_DAMAGE)
*TIME	Termination time, time step scale factor and output interval

**\*CONTACT**

Card 1:1 (2i10,2e10.3)

1	2	3	4	5	6	7	8
SID	MID	PFAC	FRIC				

SID            Slave node set ID  
MID            Master set ID  
                  GT.0 ID of segment set  
                  LT.0 -ID of primitive  
PFAC           Penalty factor  
FRIC           Coefficient of friction

Comment:

For contact with primitives, PFAC is the fraction of the applied penalty stiffness and the critical one (from a numerical stability point of view).

For contact with segments PFAC [N/m<sup>3</sup>] is the absolute stiffness of the contact interface:

Contact pressure = PFAC × Penetration distance [N/m<sup>2</sup>]

**\*DEFINE\_CURVE**

Card 1:n (i10)

1	2	3	4	5	6	7	8
CID							

Card m:n (2e10.3)

1	2	3	4	5	6	7	8
Tm	Fm						

CID            Curve ID  
Tm             Time point *m*  
Fm             Function value *m*

**\*DEFINE\_PRIMITIVE***Card 1:2 (2i10,6e10.3)*

1	2	3	4	5	6	7	8
PRID	PRTYPE	VX	VY	VZ			

*Card 2:2 (8e10.3)*

1	2	3	4	5	6	7	8
X1	X2	X3	X4	X5	X6	X7	X8

PRID            Primitive ID  
PRTYPE        Primitive type  
                 EQ.1 sphere  
                 EQ.2 plane  
VX             Velocity in x-direction  
VY             Velocity in y-direction  
VZ             Velocity in z-direction  
X1-X8         Defines the primitive geometry

Sphere:

The initial center of the sphere is located at the coordinate (X1,X2,X3).  
The radius is equal to X4.

Plane:

(X1,X2,X3) is a point on the plane and (X4,X5,X6) is the plane normal direction.

**\*ELEMENT\_SOLID***Card m:n (10i8)*

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
EID <sub>m</sub>	PID <sub>m</sub>	N1 <sub>m</sub>	N2 <sub>m</sub>	N3 <sub>m</sub>	N4 <sub>m</sub>	N5 <sub>m</sub>	N6 <sub>m</sub>	N7 <sub>m</sub>	N8 <sub>m</sub>

EID<sub>m</sub>        Element ID  
PID<sub>m</sub>        Part ID to which the element belongs  
N1<sub>m</sub>-N8      Element nodes

**\*HISTORY\_ELEMENT**

Card m:n (8i10)

1	2	3	4	5	6	7	8
EID1m	EID1m	EID3m	EID4m	EID5m	EID6m	EID7m	EID8m

EID1m-EID8m Element ID's

---

**\*HISTORY\_NODE**

Card m:n (8i10)

1	2	3	4	5	6	7	8
NID1m	NID2m	NID4m	NID4m	NID5m	NID6m	NID7m	NID8m

NID1m-NID8m Node ID's

---

**\*INITIAL\_ORIENTATION**

Card m:n (i8,9f9.3)

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
PIDm	C <sub>11</sub>	C <sub>21</sub>	C <sub>31</sub>	C <sub>12</sub>	C <sub>22</sub>	C <sub>32</sub>	C <sub>13</sub>	C <sub>23</sub>	C <sub>33</sub>

PID Part ID

C<sub>ij</sub> Initial components of the matrix defining the crystal orientation

---

**\*INITIAL\_VELOCITY**

Card 1:1 (i10,3e10.3)

1	2	3	4	5	6	7	8
NSID	VX	VY	VZ				

NSID Node set ID

VX Initial velocity in x-direction

VY Initial velocity in y-direction

VZ Initial velocity in z-direction

**\*MAT**

Card 1:4 (i10,3e10.3)

1	2	3	4	5	6	7	8
MID	MTYPE	RHO	YOUNG	PR			

Card 2:4 (8e10.3)

1	2	3	4	5	6	7	8
C1	C2	C3	C4	C5	C6	C7	C8

Card 3:4 (8e10.3)

1	2	3	4	5	6	7	8
C9	C10	C11	C12	C13	C14	C15	C16

Card 4:4 (8e10.3)

1	2	3	4	5	6	7	8
C17	C18	C19	C20	C21	C22	C23	C24

MID Material ID

MTYPE Material type

EQ.1 Isotropic plasticity with linear hardening

EQ.2 Crystal plasticity with linear hardening (FCC)

EQ.3 Crystal plasticity, based on dislocation densities and dislocation flux (FCC)

C1-C24 Constants defining the properties of the material

**MTYPE=1**

C1 = sigy Yield stress

C2 = hard Hardening modulus

**MTYPE=2**

C1 = tau0 Initial glide plane yield stress

C2 = c Viscosity

C3 = hard Hardening modulus

**MTYPE=3**

C1 = tau0 Glide plane yield stress at dislocation densities rho0 and rhom0

C2 = c Viscosity

C3 = rho0 Total reference dislocation density

C4 = rhom0 Mobile reference dislocation density

C5 = rho(0) Initial total dislocation density

C6 = rhom(0) Initial mobile dislocation density

C7 = b Burgers vector

C8 = Q0      Crystal orientation control parameter  
C9 = z1      Material parameter  
C10= z2      "            "  
C11= z3      "            "  
C12= z4      "            "  
C13= z5      "            "  
C14= z6      "            "  
C15= rhomax Dislocation density at which the grain orientation control  
             constraints are released (for subgrain formation)



**\*NODE***Card m:n (i8,3e16.9,i8)*

1	2	3	4	5	6	7	8
NID <sub>m</sub>	X <sub>m</sub>	Y <sub>m</sub>	Z <sub>m</sub>	BC <sub>m</sub>			

ID<sub>m</sub>            Node ID

X<sub>m</sub>            x-coordinate

Y<sub>m</sub>            y-coordinate

Z<sub>m</sub>            z-coordinate

BC<sub>m</sub>            Boundary condition

                 EQ.1    Constrained in x-direction

                 EQ.2    Constrained in y-direction

                 EQ.3    Constrained in z-direction

                 EQ.4    Constrained in x and y-direction

                 EQ.5    Constrained in y and z-direction

                 EQ.6    Constrained in z and x-direction

                 EQ.7    Constrained in x, y and z-direction

---

**\*PART***Card 1:1 (2i10)*

1	2	3	4	5	6	7	8
PID	MID						

PID            Part ID

MID            Material ID

---

**\*PRESCRIBED\_MOTION***Card 1:1 (2i10)*

1	2	3	4	5	6	7	8
NSID	DIR	LCID					

NSID            Node set ID

DIR            Direction of motion

                 EQ.1    x-direction

                 EQ.2    y-direction

                 EQ.3    z-direction

LCID            Load curve ID for velocity versus time

---

**\*SET\_NODE**

Card 1:2 (i10)

1	2	3	4	5	6	7	8
NSID							

Card m:n (8i10)

1	2	3	4	5	6	7	8
N1m	N2m	N3m	N4m	N5m	N6m	N7m	N8m

NSID            Node set ID

N1m-N8m       Node ID's

**\*SET\_SEGMENT**

Card 1:2 (i10)

1	2	3	4	5	6	7	8
SSID							

Card m:n (4i10)

1	2	3	4	5	6	7	8
N1m	N2m	N3m	N4m				

SSID            Segment set ID

N1m-N4m       Nodes defining segment (m-1)

**\*STOCHASTIC\_DAMAGE**

Card 1:3 (3i10,3e10.3)

1	2	3	4	5	6	7	8
MID	HVAR	DTYPE	FVAL	CVOL	DOFF		

Card 2:3 (8e10.3)

1	2	3	4	5	6	7	8
DVAL1	DVAL1	DVAL3	DVAL4	DVAL5	DVAL6	DVAL7	DVAL8

Card 3:3 (8i10)

1	2	3	4	5	6	7	8
DENS1	DENS2	DENS3	DENS4	DENS5	DENS6	DENS7	DENS8

MID           Material ID  
 HVAR           History variable subjected to stochastic distribution  
 DTYPE         Method to compute equivalent damage  
               EQ.1 Max damage value in element  
               EQ.2 Volume weighted average damage in element  
               EQ.3 Combination of DTYPE=1 and DTYPE=2  
 FVAL          Weight function for DTYPE=3  
 CVOL          Characteristic volume  
 DOFF          Damage offset  
 DVAL1-DVAL8  Damage values  
 DENS1-DENS8  Damage density in characteristic volume

Comment:

The actual damage,  $D$ , of a specific element with volume  $VE$  is calculated as

```

DO I=1,8
  CDAM=CDAM+DENS(i)*DVAL(i)
  DO J=1,DENS(i)
    ETA=random(0)
    IF (ETA.lt.VE/VCHAR) THEN
      DMAX=max(DMAX,DVAL(j))
      DAVG=DAVG+DVAL(j)
    ENDIF
  ENDDO
ENDDO
DAVG=(DAVG*CVOL)/(CDAM*VE)
D=DOFF+FVAL*DMAX+(1-FVAL)*DAVG

```

$D$  is added to history variable HVAR.

**\*STOCHASTIC\_DISTRIBUTION**

Card 1:4 (3i10,3e10.3)

1	2	3	4	5	6	7	8
MID	HVAR	DTYPE	FVAL	CL	DOFF		

Card 2:4 (8e10.3)

1	2	3	4	5	6	7	8
AMP1	AMP2	AMP3	AMP4	AMP5	AMP6	AMP7	AMP8

Card 3:4 (8e10.3)

1	2	3	4	5	6	7	8
AMP9	AMP10	AMP11	AMP12	AMP13	AMP14	AMP15	AMP16

Card 4:4 (8e10.3)

1	2	3	4	5	6	7	8
AMP17	AMP18	AMP19	AMP20	AMP21	AMP22	AMP23	AMP24

MID           Material ID  
HVAR           History variable subjected to stochastic distribution  
DTYPE         Method to compute history variable fluctuation  
                EQ.1 Max value in element  
                EQ.2 Min value in element  
                EQ.3 Average value in element  
                EQ.4 Combination of DTYPE=1 and DTYPE=3  
                EQ.5 Combination of DTYPE=2 and DTYPE=3  
FVAL          Weight function for DTYPE=4 and DTYPE=5  
CL             Characteristic length  
DOFF          History variable offset  
AMP1-AMP24   Amplitudes in distribution

Comment:

The history variable fluctuation, D, of a specific element is added to history variable HVAR.

**\*TIME***Card 1:1 (4e10.3)*

1	2	3	4	5	6	7	8
TERM	TSSF	GOUT	HOUT				

TERM            Termination time

TSSF            Time step scale factor

GOUT            Output interval for model data

HOUT            Output interval for elements in \*HISTORY\_ELEMENT list and of  
nodes in \*HISTORY\_NODE list