



**HAL**  
open science

# Simulations tri-dimensionnelles hybrides dynamique des dislocation-éléments finis : Modélisation de l'effet de taille des couloirs de matrice des superalliages monocristallins

Aurélien Vattré, Benoit Devincré, Arjen Roos, Frédéric Feyel

## ► To cite this version:

Aurélien Vattré, Benoit Devincré, Arjen Roos, Frédéric Feyel. Simulations tri-dimensionnelles hybrides dynamique des dislocation-éléments finis : Modélisation de l'effet de taille des couloirs de matrice des superalliages monocristallins. 9e Colloque national en calcul des structures, CSMA, May 2009, Giens, France. hal-01422157

**HAL Id: hal-01422157**

**<https://hal.science/hal-01422157v1>**

Submitted on 23 Dec 2016

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



Distributed under a Creative Commons Attribution 4.0 International License

# Simulations 3D hybrides DD - EF: Modélisation de l'effet de taille des couloirs de matrice des superalliages monocristallins

Aurélien Vattré<sup>\*1</sup>, Benoit Devincré<sup>2</sup>, Arjen Roos<sup>1</sup>, Frédéric Feyel<sup>1</sup>

<sup>1</sup> DMSM (ONERA), 29 Avenue de la Division Leclerc, 92322 Châtillon Cedex, France

<sup>2</sup> LEM (CNRS-ONERA), 29 Avenue de la Division Leclerc, 92322 Châtillon Cedex, France

---

**Résumé** — Une approche tridimensionnelle Discrète-Continue (le modèle MDC) utilisant un couplage entre simulations de dynamique des dislocations (DD) et des éléments finis (EF), permet un calcul précis de l'effet de taille contrôlant le comportement mécanique d'un superalliage monocristallin. Ces simulations reposent sur un échange de données entre les deux codes aux points d'intégration du maillage EF, à savoir les contraintes et les incréments de déformation plastiques. A l'instar des lois de comportement usuelles, les déformations plastiques considérées sont ici les eigenstrains physiquement associées aux déplacements des dislocations dans un cristal. Par rapport aux versions antérieures du MDC, les nouveaux développements ont porté sur (i) la modification de la discrétisation des lignes de dislocation afin de mieux décrire les réactions de contact entre lignes et microstructure, et (ii) la procédure d'homogénéisation des eigenstrains aux points d'intégration. Les résultats obtenus montrent de façon quantitative que la limite d'élasticité simulée est directement reliée à la contrainte critique de franchissement d'obstacle d'Orowan. De plus, le taux d'écrouissage obtenu aux faibles déformations est contrôlé par la forte fraction volumique de précipités plutôt que par la taille des précipités.

**Mots clés** — Simulation hybride dynamique des dislocations - Eléments finis, effet de taille, superalliages monocristallins.

---

## 1 Introduction

La prédiction du comportement mécanique des matériaux hétérogènes à partir de leur microstructure constitue aujourd'hui un problème complexe qui nécessite des investigations à la fois physiques et mécaniques. Dans l'objectif de développer, maîtriser et optimiser de tels matériaux, les enjeux industriels associés à la compréhension des effets microstructuraux sont essentiels.

Afin de prendre en compte les effets de taille induits par une microstructure du matériau, des modélisations dites multi-échelles se sont développées aux cours de ces dernières années. Dans ce contexte, un couplage original entre simulations de DD et EF a été initié par Lemarchand *et al.* [1] et Groh *et al.* [2] à l'Onera. Ce modèle est connue sous l'appellation de Modèle Discret-Continu (MDC). Nous présentons ici, les développements récents effectués sur le MDC [3] ainsi qu'une application dédiée à la plasticité confinée dans un superalliage monocristallin. L'objectif est de comprendre et de relier les mécanismes fondamentaux de la plasticité de ce matériau complexe à ses propriétés mécaniques. Plus précisément, on étudie l'influence de la microstructure sur (i) la

---

\*aurelien.vattre@onera.fr

limite d'élasticité et (ii) le taux d'écroutissage en relation avec l'évolution de la densité de dislocations dans les couloirs de matrice.

## 2 Le modèle Discret - Continu

En bref, le MDC consiste à substituer la loi de comportement classique du code EF par une simulation de dynamique des dislocations DD. Ainsi, le code EF (ZéBuLon) est utilisé pour résoudre les équations d'équilibre global du problème mécanique (Eq. 1), tandis que la simulation de DD (microMegs) permet de décrire les processus fondamentaux physiques de la déformation plastique, c'est à dire principalement le glissement des dislocations, vecteur de la déformation plastique. Dans le calcul EF, les dislocations sont décrites à travers les eigenstrains reliées aux cisaillements élémentaires induits par le mouvement des dislocations [4].

Notons qu'il existe depuis quelques années d'autres approches de simulation hybride, plus ou moins proches de la solution du MDC [5, 6, 7, 8, 9]. Chacunes de ces méthodes présentent des avantages et inconvénients en comparaison avec le MDC (écriture aux grandes déformations, type de code DD sous jacent, résolutions des interactions à courte distance...). Un article en rédaction discutera les spécificités du MDC en détails [3].

Pour des raisons de simplicité et de mise en oeuvre, les simulations conventionnelles de DD considèrent un milieu isotrope et périodique infini. Le principal intérêt du MDC est de proposer une solution mécaniquement exacte permettant de prendre en compte des conditions aux limites complexes telles que les effets de surfaces pour un solide fini ou les hétérogénéités de chargement induit par une microstructure. On considère un volume de simulation  $\Omega$  de forme quelconque pouvant contenir une ou plusieurs phases plastifiables  $\Omega_k$  dans lesquelles la dynamique de dislocations est définie par les propriétés élastiques  $L_k$ , les orientations cristallographiques et des lois de mobilité fonction de la chimie de chacune des phases.

Le volume simulé  $\Omega$  peut être chargé en traction  $\mathbf{T}$  sur la surface  $S_f$  et/ou en déplacement  $\mathbf{U}$  sur la surface  $S_u$ . En absence de forces de volume, l'état d'équilibre du volume total est décrit par le champ de contrainte  $\sigma$  et le champ de déformation total  $\epsilon$ . Ceux-ci doivent satisfaire le système d'équation :

$$\begin{aligned} \sigma \cdot \mathbf{n} &= \mathbf{T}, \text{ sur } S_f \\ \mathbf{u} &= \mathbf{U}, \text{ sur } S_u \\ \nabla \cdot \sigma &= \vec{0} \\ \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) &= \epsilon \\ \sigma_k &= L_k : (\epsilon_k - \epsilon_k^p), \text{ in } \Omega_k \end{aligned} \tag{1}$$

Le problème alors posé équivaut à remplacer le calcul de déformation plastique  $\epsilon_k^p$ , usuellement donné par une loi de comportement, par le calcul des cisaillements plastiques induits par une densité locale de dislocation. Dans le schéma MDC, chaque dislocation discrète  $i$  est individuellement prise en compte à travers l'eigenstrain  $\epsilon_{k,i}^p$  qu'elle a généré pour arriver à sa position instantanée. Les eigenstrains contiennent donc tout l'historique du déplacement des dislocations. En pratique, le calcul des eigenstrains nécessite un volume de "coarse graining"  $V_{ele}$  entourant chaque segment de dislocation [1] et contenant un ensemble de points d'intégration du maillage EF. Ces eigenstrains peuvent par exemple être visualisées au niveau du maillage élément fini dans le cas simple d'une boucle de dislocation prismatique isolée (figure 1). On notera que les microstructures de dislocations considérées initialement dans une simulation MDC doivent être impérativement constituées de boucles fermées afin de satisfaire l'équilibre mécanique (Eq. 1). Par ailleurs, il faut souligner que nos développements récents du MDC tirent profit numériquement de la méthode de discrétisation des dislocations sur réseau utilisé dans le code de simulation DD microMegs

[10]. Comme le montre la figure 2, le dialogue entre les codes de DD et EF repose sur deux pro-

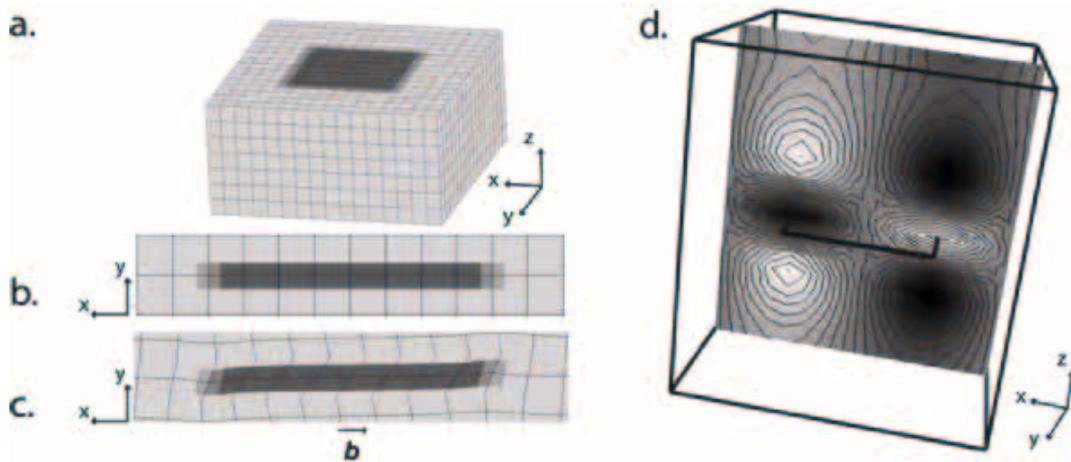


Figure 1 – a. illustration de l'eigenstrain  $\epsilon_{31}^p$  générée par une boucle prismatique carrée sur un plan cubique ; b. même eigenstrain suivant un plan de coupe d'orienté [010] ; c. illustration du déplacement associé à  $\epsilon_{31}^p$  et d'amplitude le vecteur de Burgers  $\|\vec{b}\|$  (grossissement  $\times 200$ ), et d. illustration du champs de contraintes  $\sigma_{12}$  reconstruit par les EF.

cédures : (i) une première d'homogénéisation, qui permet de calculer l'eigenstrain induite par le déplacement de chaque segment de dislocation et de remonter un incrément de déformation plastique sur chaque point d'intégration du maillage EF ; et (ii) une procédure d'interpolation, qui à partir de l'incrément de la déformation totale imposée aux points d'intégration issu du bilan d'équilibre, donne la contrainte au centre des segments de dislocation nécessaire à la résolution de la dynamique.

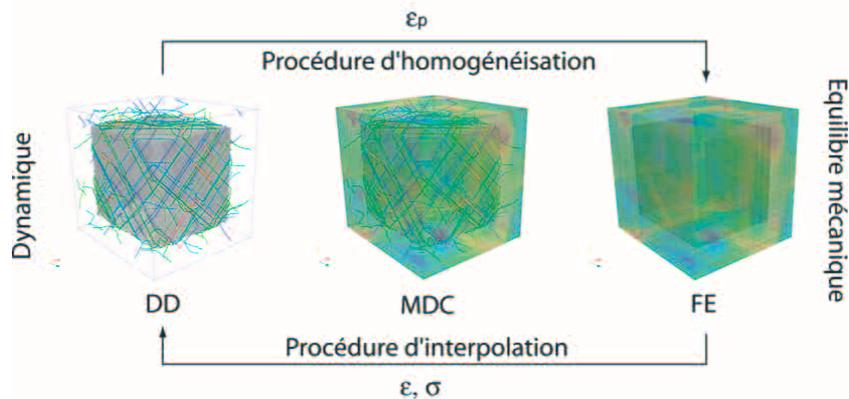


Figure 2 – Illustration du couplage entre le code par Eléments Finis (EF : ZéBuLoN) et la simulation par Dynamique des Dislocations (DD : microMégas) : le Modèle Discret - Continu (MDC).

### 3 Simulations

Aujourd'hui, les modèles traditionnels de la mécanique des milieux continus ne permettent pas encore de rendre compte de nombreux effets de taille associés aux propriétés intrinsèques des dislocations telles que la tension de ligne ou les interactions élastiques à longues distances. C'est pourquoi, des simulations MDC en 3D ont été effectuées afin de comprendre l'effet de confinement

plastique dans les couloirs de matrice des superalliages monocristallins biphasés. On considère une cellule élémentaire de simulation (de longueur  $L$ ) contenant un précipité en présence de conditions aux limites périodiques. Le maillage EF associé à cette cellule est constitué de  $16 \times 16 \times 16 = 4096$  éléments quadratiques. La microstructure ainsi définie est un réseau régulier de précipités  $\gamma'$  séparé par des couloirs de matrice de dimension  $l_{couloir}$ . Trois microstructures distinctes, correspondant à des cellules périodiques de géométrie  $0.48x \times 0.50x \times 0.52x \mu m^3$  avec  $x = 1, 2$  et  $3$ , sont déformées suivant l'axe de traction  $[001]$ . Pour chaque cas, la densité de dislocation initiale est identique et uniformément répartie sur les 12 systèmes de glissement octaédriques  $(111)[1\bar{1}0]$ .

Il est important de noter que la transformation imposée à la cellule simulée est une homothétie affine afin de garder la fraction volumique de précipités (61%) constante. Tous les tests de traction ont été réalisés à  $\dot{\epsilon} = 20 s^{-1}$  et jusqu'à des déformations plastiques d'environ  $\gamma^p = 0.2\%$ . Pour des raisons de simplicité nous rapportons ici les résultats obtenus dans le cas du comportement des superalliages monocristallins à hautes températures, revenant ainsi à considérer les précipités  $\gamma'$  élastiques. Une étape préliminaire est nécessaire avant chaque simulation pour générer dans la microstructure les contraintes internes induites par le désaccord paramétrique entre les phases matrice et précipité. La microstructure simulée subit ainsi un différentiel de coefficient de dilatation correspondant à un désaccord de paramétrique de  $-0.3\%$ , générant des contraintes de von Mises de l'ordre de  $\approx 80$  MPa dans les couloirs de matrice. On mentionnera enfin que la mobilité des dislocations dans la phase matrice est simplement proportionnelle à la contrainte résolue effective en considérant l'existence d'une contrainte de friction de 109 MPa [11]. L'ensemble des paramètres des simulations est référencé dans [12].

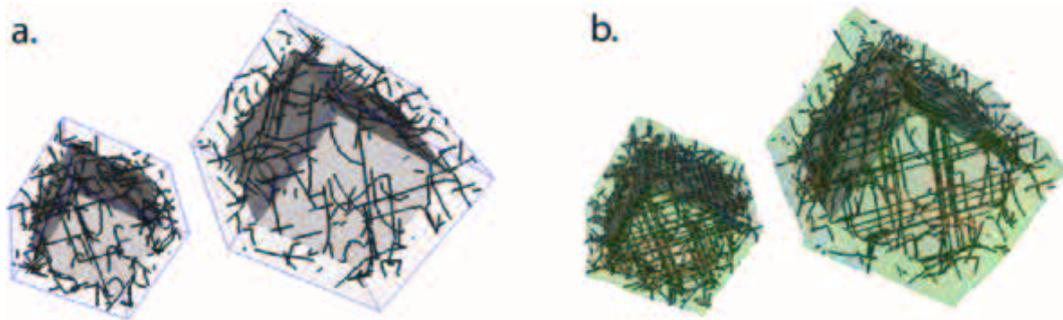


Figure 3 – Evolution des microstructures de dislocation depuis l'état initial (a.) jusqu'à une déformation de  $\gamma^p = 0.1\%$  (b.). La densité de dislocation initiale est  $\approx 2.10^{13} m^{-2}$ . On notera l'accumulation des dislocations aux interfaces après déformation.

## 4 Résultats et discussion

La figure 4 rassemble les principaux résultats du MDC pour les simulations présentées au paragraphe précédant. La figure 4 a. montre les réponses mécaniques obtenues à travers la courbe contrainte résolue en fonction de la déformation plastique  $\gamma^p$  pour les trois tailles de couloirs de matrice testées. Deux domaines peuvent être distingués sur ces courbes. Le premier (jusqu'à  $\gamma^p \approx 0.01\%$ ) correspondant à un régime de transition, pendant lequel la déformation plastique vient principalement du déplacement des dislocations initialement présentes dans la matrice vers les interfaces du précipité. La valeur de la contrainte à 0.01% de déformation plastique peut être assimilée à la limite élastique "vraie" du superalliage. En deçà de cette contrainte, les dislocations ne se courbent pas suffisamment pour glisser dans les couloirs de matrice et générer une déformation plastique irréversible.

La figure 4 b illustre les variations de la limites d'élasticité à 0.01% et à 0.1% en fonction

de la microstructure simulée. En accord avec l'expérience, la contrainte croît lorsque la taille des couloirs décroît. Plus précisément, on obtient une dépendance de la contrainte  $\tau_{0.01\%}$  assimilée à la limite élastique "vraie" qui varie comme l'inverse de la largeur des couloirs de matrice. Ce résultat est quantitativement consistant avec un calcul de la contrainte critique d'Orowan  $(\alpha\mu b)/l_{\text{couloir}}$  avec  $\alpha \approx 1.1$ .

Dans le second domaine, i.e. au delà de la limite élastique "vraie", le taux de durcissement est pratiquement constant (Fig. 4 b) et la déformation plastique vient du glissement de nombreuses dislocations dans les couloirs de matrice. Maintenant, les dislocations mobiles déposent des lignes sur les interfaces  $\gamma/\gamma'$  engendrant des contraintes internes qui relaxent les contraintes de désaccord paramétrique. Remarquons que le taux d'écrouissage,  $\theta = d\tau/d\gamma$ , est sensiblement le même pour les trois tailles de couloir. Cela suggère que  $\theta$  est principalement fonction de la fraction volumique de précipités, plutôt que de la taille de ces derniers. Ce résultat peut sembler surprenant aux vus des taux de stockage de densité de dislocations (Fig. 4 c) qui augmentent sensiblement lorsque l'on réduit la taille des précipités (à fraction volumique constante). Cette dernière dépendance du taux de stockage de dislocation est à relier à une propriété géométrique telle que  $d\rho/d\gamma \propto 1/l_{\text{couloir}}$ . Par ailleurs, au cours de la déformation plastique, la microstructure de dislocation obtenue ne contient aucun empilement de dislocation pouvant justifier un effet de "source shortening" dans les couloirs de matrice, mais plutôt un tapissage régulier de dislocations polarisées aux interfaces du précipité (c.f. Fig. 3).

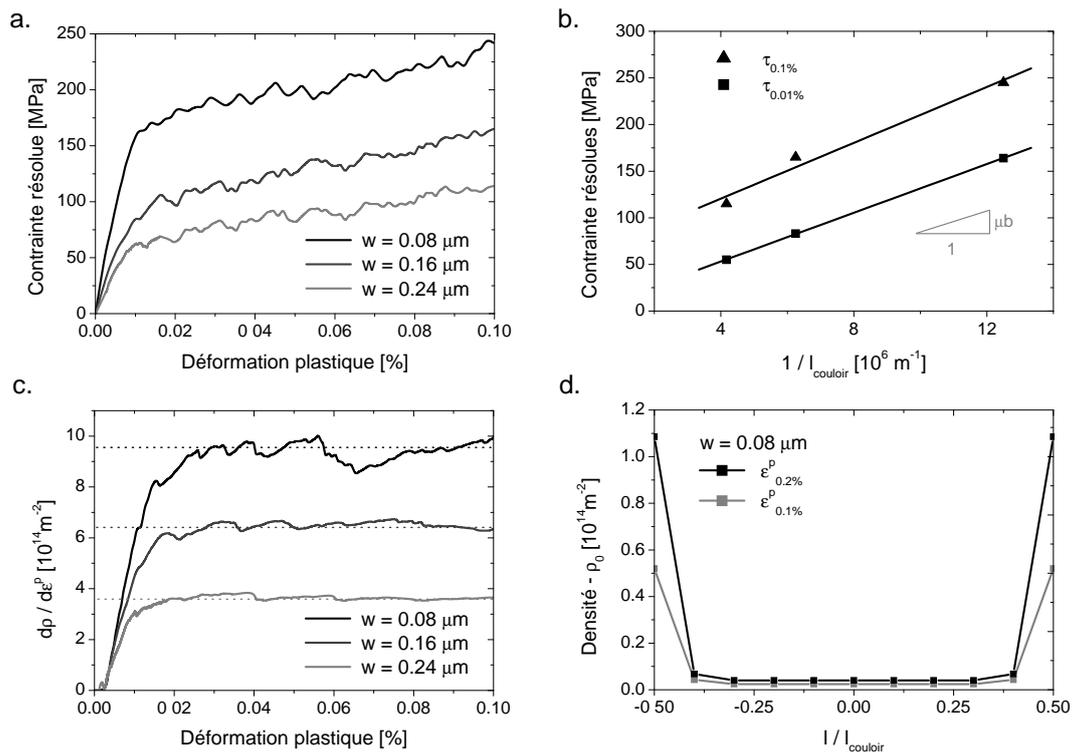


Figure 4 – a. Courbes contrainte résolue (MPa) - déformation plastique (%) pour trois tailles de couloirs de matrice (0.08, 0.16 et 0.24  $\mu\text{m}$ ) avec une fraction volumique identique ( $f = 61\%$ ), b. Courbes contrainte résolue (MPa) en fonction de  $1/l_{\text{couloir}}$  pour  $\gamma^p = 0.01\%$  et  $0.1\%$  pour les 4 largeurs de couloir, c. taux de croissance des densités de dislocation en fonction de la déformation plastique, et d. le profil des densités de dislocation dans la matrice pour une taille de couloir de 0.08  $\mu\text{m}$ .

Afin d'illustrer ce point, la figure 4 d. montre le profil de densité de dislocation moyennée à 0.1% et à 0.2% de déformation plastique et dans le cas de la microstructure avec des couloirs de matrice de largeur  $0.08 \mu\text{m}$ . Ces profils ont été réalisés en calculant la densité de dislocation sur dix tranches de largeur de 8 nm autour des précipités. Les profils ainsi obtenus montrent clairement une forte accumulation des dislocations près des interfaces. Les contraintes internes limitant l'écoulement plastique dans les couloirs de matrice est donc physiquement contrôlé par une forte densité de dislocation aux interfaces. Afin de renforcer ces observations, des simulations à déformation plus importante sont en cours.

## 5 Conclusion

Une approche couplée entre une simulation par dynamique des dislocations et un code d'éléments finis a été développée permettant de mettre en évidence un effet de taille des couloirs de matrice des superalliages monocristallins. Associant les approches discrètes et continues de la plasticité, ce couplage permet de simuler un comportement collectif des dislocations dans un cristal, difficile à reproduire avec les approches classiques de la mécanique des milieux continus. Les résultats montrent de façon quantitative que la limite d'élasticité est associée à la longueur interne du matériau, à savoir la largeur du couloir de matrice. Cet effet de confinement est à mettre en relation avec la courbure (tension de ligne) de la dislocation. Si la contrainte effective perçue par cette dislocation dépasse une contrainte critique (inversement proportionnelle à la largeur des couloirs), la dislocation peut entrer et glisser dans les couloirs de matrice. Par ailleurs, aux vues des faibles déformations plastiques simulées, le taux d'écrouissage semble être lié à un stockage homogène de dislocations aux interfaces. Les études microstructurales menées avec le MDC, telles que celles discutées ici, sont une étape importante à la mise en oeuvre de modèles continus locaux ou non-locaux pour la prédiction des propriétés mécaniques des superalliages monocristallins.

## Références

- [1] C. Lemarchand, B. Devincre, L. P. Kubin, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **49**, 1969-1982, 2001.
- [2] S. Groh, Thèse de doctorant de l'université Paris XI, Orsay, 2003.
- [3] A. Vattré, B. Devincre, A. Roos, en préparation.
- [4] E. Kröner, In L. Collatz, F. Lösch (Editors) : *Ergebnisse der angewandten Mathematik*, **5**, Springer, 1958.
- [5] E. Van der Giessen, A. Needleman, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, **3**, 689-735, 1995.
- [6] M. Fivel, G. R. Canova, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, **7**, 753-768, 1999.
- [7] H. M. Zbib, T. de la Rubia, *International Journal of Plasticity*, **18**, 1133-1163, 2002.
- [8] R. Gracie, J. Oswald, T. Belytschko, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **56**, 200-214, 2008.
- [9] Z. L. Liu, X. M. Liu, Z. Zhuang, X. C. You, *International Journal of Plasticity*, 2009.
- [10] B. Devincre, L. P. Kubin, C. Lemarchand, R. Madec, *Materials Science and Engineering*, **309**, 201-219, 2001.
- [11] G. Saada, J. Douin, *Philosophical Magazine*, Volume 84, No. **8**, pp. 807-824, 2004.
- [12] A. Vattré, B. Devincre, A. Roos, soumis à *Intermetallics*, 2009.