

Modélisation par éléments finis des interactions entre boucles de dislocation et précipités γ' tertiaires dans un superalliage base nickel

V. Chiaruttini, C. Bovet, J.-D. Garaud, A. Vattré

ONERA, Université Paris-Saclay, DMAS/MS2, 29 av Division Leclerc F-92320 Châtillon, France,
{vincent.chiaruttini,christophe.bovet,jean-didier.garaud,aurelien.vattré}@onera.fr

Résumé — Dans la poursuite de travaux antérieurs sur la simulation par éléments finis des boucles de dislocation dans des microstructures complexes, nous présentons une démarche adaptée à la modélisation de défauts multiples rencontrés dans les superalliages monocristallins à base de nickel. Notre stratégie numérique est capable de modéliser des microstructures réalistes, caractérisées par des facteurs d'échelle supérieurs à 10^3 entre les dimensions élémentaires des différents objets en interaction. Basée sur une approche par intersection de maillage mise en oeuvre dans le nouveau code A-set, co-développé par l'ONERA, l'École des Mines de Paris et Safran Tech, notre stratégie de discrétisation 3D des microstructures de type γ/γ' est illustrée, mettant l'accent sur la description topologique des boucles de dislocations, définies comme l'ensemble des segments constituant leur pourtour, ainsi que l'insertion paramétrique de défauts γ' tertiaires. Combinée à une méthode par remaillage automatique adaptatif, des discrétisations contenant des dizaines de boucles de dislocation et/ou des centaines de précipités tertiaires dans les couloirs sont produites. Enfin, un solveur par décomposition de domaine est utilisé pour résoudre les problèmes mécaniques formulés sur de telles configurations.

Mots clés — boucles de dislocation, éléments finis, remaillage, superalliage, interactions, précipités, HPC

1 Introduction

Les hautes performances des moteurs aéronautiques modernes sont rendues possibles par l'utilisation depuis les années 1980 de superalliages monocristallins à base nickel. Ces matériaux sont en effet capables de résister à des conditions extrêmes (température, chargement mécanique (vibratoire), oxydation, etc.) qui règnent dans les pièces tournantes des parties chaudes des moteurs, comme les aubages des turbines haute pression.

De nombreuses études ont été consacrées au comportement mécanique des monocristaux de superalliages. Les principales caractéristiques de ce comportement sont une forte anisotropie et une dépendance à la température, liées notamment aux fortes interactions mécaniques se produisant entre les différents constituants de la microstructure composés d'une matrice austénitique γ de nickel et de différentes populations de précipités γ' qu'on peut classer suivant leur taille : (i) les précipités primaires de 1 à 10 microns incohérents avec la matrice, (ii) les précipités secondaires d'environ quelques centaines de nanomètres, orientés en relation avec la matrice et (iii) les précipités tertiaires, intergranulaires et cohérents avec la matrice, de forme globulaire d'environ une dizaine de nanomètres.

Plusieurs travaux [1, 2, 3] tendent à montrer que les précipités tertiaires ont une influence significative sur la limite d'élasticité des alliages et jouent également un rôle important dans le comportement du matériau et son évolution sous charge. Cependant, la compréhension des mécanismes d'interaction entre les défauts discrets, tels que les dislocations et ces précipités multiples, reste un problème particulièrement délicat à modéliser. En particulier, l'effet du contournement d'Orowan des dislocations autour des précipités tertiaires sur les propriétés macroscopiques est un problème théorique qui reste aujourd'hui hors d'atteinte. En effet, il reste très difficile d'étudier une plasticité discrète décrite par une dynamique des dislocations à grande échelle : en particulier, lorsque les dislocations sont plongées dans des matériaux élastiquement anisotropes, en interaction à courtes et longues portées avec des interfaces homophases (joints de grain) et hétérophases entre des phases de dimensions très différentes. Par ailleurs, les conditions aux limites complexes appliquées aux structures en présence éventuelle de fissures ne sont

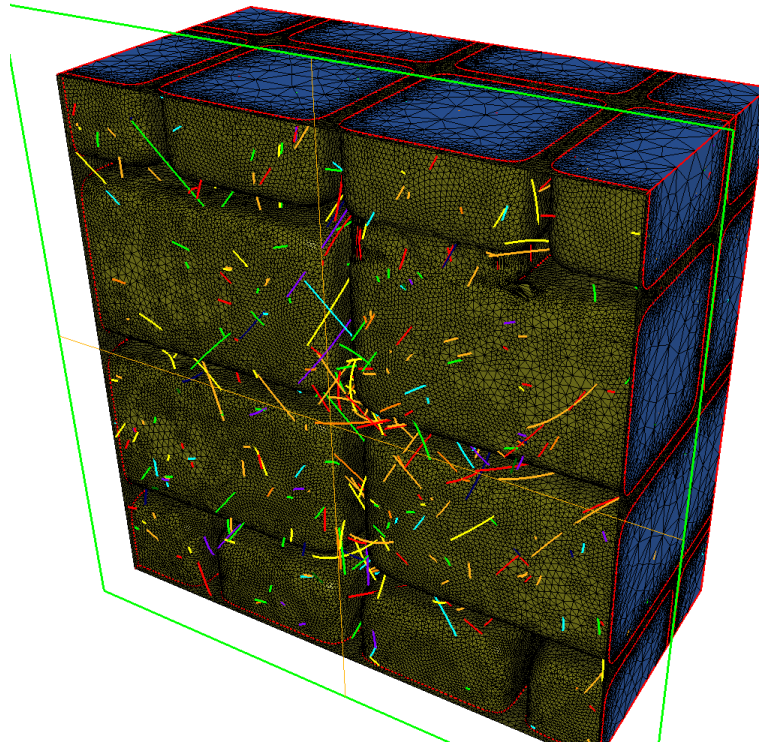


FIGURE 1 – Représentation d’une coupe microstructurale du maillage d’un volume représentatif (VER) de superalliage (où la matrice de nickel n’est pas visible) en présence de fronts de dislocation de couleurs différentes, évoluant dans les couloirs entre des précipités secondaires cuboidaux en jaune.

encore trop peu considérées dans la littérature. Aussi, bien que de telles simulations offrent la promesse de prédire les évolutions de la microstructure, des dislocations ainsi que de modéliser les comportements constitutifs des métaux polycristallins et/ou multiphasés [4, 5, 6], les codes existants de dynamique des dislocations discrètes ne peuvent être adaptés à la prise en compte de l’ensemble de ces difficultés. Ainsi à l’exception de quelques équipes mondialement reconnues des traitements numériques avancés basés sur des séries harmoniques sphériques pour calculer les fonctions élastiques de Green [7], les simulations de dynamique de dislocations sont généralement réalisées dans le cadre de l’élasticité isotrope, des conditions aux limites périodiques standards et des conditions de chargement uniformes simples. En outre, des simulations ne peuvent facilement s’adapter à la modélisation à large facteur d’échelle rencontrée dans la modélisation rigoureuse des microstructures γ/γ' en présence de précipités secondaires et tertiaires.

Pour dépasser ces limites, de nouvelles solutions anisotropes pour les boucles de dislocation de formes complexes ainsi qu’une approche fondée sur les éléments finis ont récemment été introduites [8]. Cette dernière approche, validée par les solutions semi-analytiques, permet la simulation de boucles de dislocations en interaction entre elles, dans des microstructures multiphasées, voire dans des structures polycristallines de géométries complexes. Cependant, l’utilisation de telles méthodes restait, jusqu’à présent, limitée à la simulation de quelques boucles de dislocation. On se propose dans ces travaux de l’étendre à la modélisation d’une microstructure d’un superalliage monocristallin, en détaillant principalement notre approche par remaillage conforme, orientée vers le calcul haute performance récemment introduite dans le code A-set développé notamment par l’ONERA.

La section 2 est consacrée à la description du problème modèle et sa résolution par éléments finis. La section 3 décrit la démarche de discrétisation d’une microstructure monocristalline. Enfin, la section 4 illustre cette démarche par un premier résultat de simulation.

2 Description du problème mécanique et résolution éléments finis

La figure 1 présente un volume élémentaire représentatif (VER) discrétisé de superalliage base nickel, modélisé comme un milieu continu élastique linéaire hétérogène anisotrope. Des boucles de dislocation représentatives des phénomènes de plasticité confinée glissent dans la matrice γ du matériau entre des

précipités γ' . Ce type de modèle permet notamment d'étudier le mécanisme fondamental d'Orowan, laissant une boucle de dislocation autour d'un précipité à l'aide d'une méthode combinant la méthode des éléments finis et remaillage adaptatif.

Dans cette première approche de modélisation des superalliages, l'ensemble du domaine Ω est considéré comme biphasique : avec un ensemble "matrice" Γ où baignent un ensemble disjoints de "précipités" Γ' , comprenant des frontières internes de grains avec différentes topologies et caractéristiques. Les frontières des précipités ainsi que les éventuels vides ou surfaces libres sont traités comme imperméables aux boucles de dislocation, de sorte que le mouvement des dislocations est confiné à l'intérieur de la matrice Γ . Le solide $\Omega = \Gamma \cup \Gamma'$ est également entouré d'une frontière externe fermée $\partial\Omega$, où des conditions périodiques peuvent s'appliquer sur un VER, comme des conditions de traction et/ou de déplacements imposées sur des portions disjointes en cas de bord libre. L'intérieur de la matrice Γ intègre une population constituée de K boucles de dislocation discrètes S^k , avec $k = 1, \dots, K$.

En trois dimensions, le problème aux limites élastique pour un superalliage disloqué Ω , avec une frontière $\partial\Omega$, est formulé par les équations et les conditions aux limites suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \sigma_{k,j,k}(\mathbf{x}) = c_{kjml} u_{m,lk}(\mathbf{x}) = 0, & \forall \mathbf{x} \in \Gamma \\ \sigma'_{k,j,k}(\mathbf{x}) = c'_{kjml} u_{m,lk}(\mathbf{x}) = 0, & \forall \mathbf{x} \in \Gamma' \\ \sigma_{kj}(\mathbf{x}) n_j^{ext}(\mathbf{x}) = t_k^N(\mathbf{x}), & \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega_t \\ u_k(\mathbf{x}) = u_k^D(\mathbf{x}), & \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega_u \\ \llbracket \sigma_{kj}(\mathbf{x}) n_j^k \rrbracket_+ = 0, & \forall \mathbf{x} \in S^k \\ \llbracket u_k(\mathbf{x}) \rrbracket_+ = b_k^k \chi^*(\mathbf{x}), & \forall \mathbf{x} \in S^{k*}, \end{array} \right. \quad (1)$$

où la première équation traduit l'équilibre statique dans la matrice Γ (dont le tenseur élastique est c_{kjml}), la seconde dans l'équilibre dans les précipités Γ' (tenseur élastique est c'_{kjml}), tandis que la troisième et quatrième équations sont liées aux conditions aux limites de Neumann et de Dirichlet prescrites, avec $n^{ext}(\mathbf{x})$ le vecteur normal extérieur en tout point \mathbf{x} appartenant à $\partial\Omega$. Dans l'équation (1), les deux dernières conditions aux limites sont associées aux exigences intrinsèques de traction et de saut de déplacement imposées sur chaque boucle de dislocation discrète S^k , qui sont décrites par le vecteur normal local et unitaire \mathbf{n}^k , correspondant aux plans cristallographiques, ainsi qu'au vecteur de Burgers \mathbf{b}^k des dislocations glissant dans la matrice Γ . Dans le cadre de notre approche par éléments finis, la fonction linéaire de régularisation pour les cœurs de dislocation dans l'équation (1) est paramétrée par

$$\chi^*(\mathbf{x}) = \min(D(\mathbf{x}, \mathbf{x}_{\partial D})/r_0, 1), \quad (2)$$

où $D(\mathbf{x}, \mathbf{x}_{\partial D})$ est la distance Euclidienne entre \mathbf{x} et la position des fronts de dislocation ∂S^k à $\mathbf{x}_{\partial D}$, en intégrant le rayon de cœur des dislocations $r_0 \geq 0$. En dehors des boucles de dislocation S^k , les champs de contraintes de traction et de déplacement sont continus sur toutes les interfaces internes, bien que des conditions d'interface motivées physiquement [9, 10] puissent être incluses dans le problème aux limites.

La démarche de résolution par éléments finis d'un tel système, comme la méthode de calcul des forces configurationnelles nécessaires à la simulation des phénomènes de déformation plastiques par dynamique des dislocations est détaillée dans [8] pour le cas des polycristaux. Cette démarche générique est parfaitement adaptée aux cas des superalliages, objets de cette étude.

3 Méthodologie de discrétisation des microstructures γ/γ' avec précipités tertiaires

L'étude des interactions entre boucles de dislocations et précipités tertiaires fait intervenir des échelles très différentes où il convient pourtant de bien représenter les champs mécaniques dans les zones de concentration de contrainte produites par les hétérogénéités : du nanomètre à proximité du cœur de dislocation, au micron sur le VER en passant par la dizaine de nanomètres pour les précipités tertiaires et quelques centaines de nanomètres pour les précipités secondaires, comme illustré sur la figure 2. Les opérations à mener pour obtenir une représentation discrète et réaliser des simulations sur ce type de configuration sont présentées dans la suite.

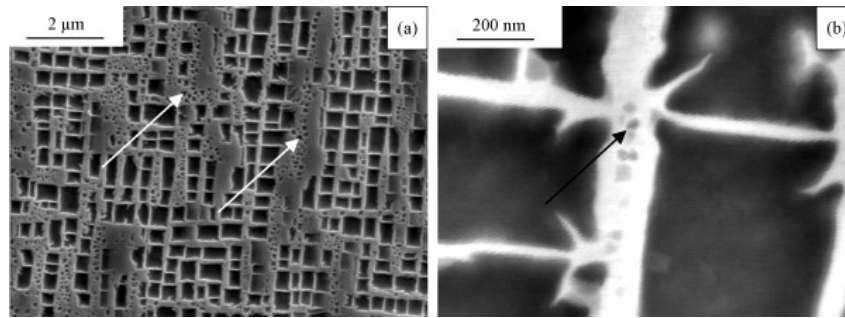


FIGURE 2 – Représentation d’une microstructure de superalliage MC2 après 180s de surchauffe : (a) vue globale avec indication des couloirs γ où se produisent des précipitations γ' tertiaires, (b) zoom sur un couloir de précipitation tertiaire (images issues de [3]).

3.1 Maillage de la microstructure sans boucles de dislocation

La génération du maillage volumique de la microstructure est réalisée à partir de la succession d’opérations suivante :

1. Paramétrées par une taille caractéristique de couloir h_r , des surfaces cuboïdales sont maillées à partir de sphères de rayon r_s déformées à l’aide d’une fonction puissance d’exposant p (p est choisi à une valeur proche de 0,2). Une variabilité morphologique peut être prise en compte en considérant aléatoirement des précipités de dimension doublée dans n’importe quelle direction du VER, ainsi qu’une distribution aléatoire de liaisons (pour former des précipités en forme de "L" ou de "C"). Un ensemble de surfaces dessinant les précipités γ' secondaires est alors obtenu (figure 3), le taux de matrice de la microstructure dépend surtout du choix des paramètres r_s et h_r , mais est également influencé par l’exposant p et la variabilité morphologique des précipités.
2. L’étape suivante consiste à générer une distribution aléatoire de précipités tertiaires γ' de forme sphérique dans les couloirs. Cette opération est menée avec un tirage aléatoire des positions des centres des sphères et de leurs rayons (ces derniers suivant une loi normale entre r_t et $2r_t$), en vérifiant que les sphères se situent uniquement dans les couloirs de matrices et qu’elles soient séparées entre elles d’une distance minimale δ_t . Les faibles taux de remplissage ne posent pas de difficultés particulières pour ces tirages, aussi des contraintes de périodicité peuvent être ajoutées sans pénaliser le temps de génération du maillage surfacique, qui ne dure que quelques millisecondes jusqu’à des grilles de $50 \times 50 \times 50$ et des milliers de précipités tertiaires nanométriques, dans notre mise en oeuvre multithreadées au sein du code A-set.
3. La frontière de la microstructure est ensuite définie à l’aide d’une surface cubique qui peut englober toute la zone, comme une sous-partie.
4. À cette étape, le maillage est constitué d’un ensemble d’éléments triangulaires qui peuvent se chevaucher. Une opération d’intersection de maillage surfacique est alors menée, en utilisant un algorithme multithreadé, produisant un maillage surfacique conforme. Enfin, après avoir généré une carte de taille de maille adaptée aux différentes hétérogénéités, les maillages MeshGems de SPATIAL¹ sont utilisés pour générer un maillage tétraédrique conforme de la microstructure (cf. figure 3).

3.2 Discrétisation des boucles de dislocations

Pour dépasser les limites de l’approche présentée dans nos précédents travaux [8], qui repose notamment sur une méthode en deux temps (insertion initiale, puis propagation par extension ou morphing des boucles - en cas rétrécissement -), une description traditionnelle comme celle utilisée en Dynamique des Dislocations (DD) est retenue. Chaque boucle planaire est définie par sa normale, son vecteur de Burgers, ainsi qu’un ensemble de segments définissant la position du coeur de la dislocation. Certaines boucles peuvent désormais être coplanaires, permettant dès lors de simuler des interactions coplanaires (similaires à celles observées dans une source de Frank-Read).

1. <https://www.spatial.com>

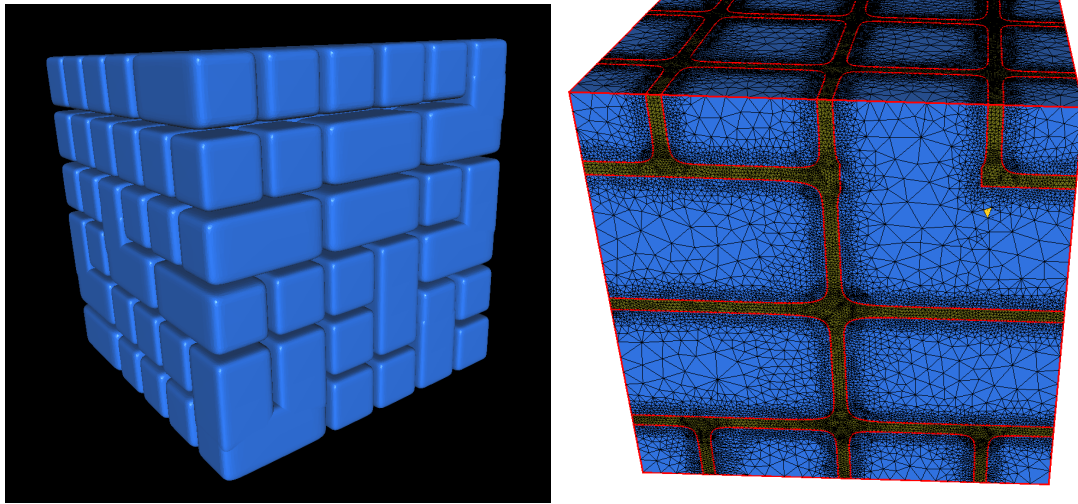


FIGURE 3 – Exemple de représentation surfacique d’un ensemble de précipités γ' secondaires avec une variabilité morphologique, à gauche, et exemple de maillage tétraédrique généré, à droite.

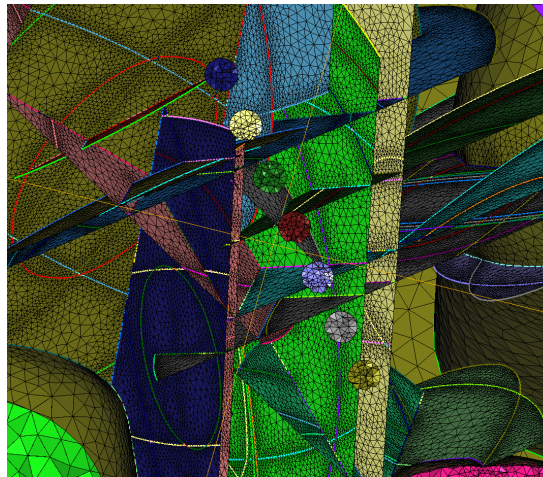


FIGURE 4 – Représentation du maillage surfacique au sein d’un couloir de nickel, avec 5 précipités Γ' tertiaires alignés (au centre), et une cinquantaine de boucles de dislocation elliptiques (dont les plans de cisaillement sont maillés).

La démarche de génération du modèle avec dislocations conduit à repartir d’un maillage surfacique ou volumique conforme de la microstructure en ajoutant les étapes suivantes :

1. Après un positionnement initial aléatoire ou lors d’une démarche dynamique, comme pour les méthodes de type DD, les segments définissant les coeurs de dislocations sont éventuellement déplacés suite à l’application d’un incrément de vitesse et modifiés par des règles locales (fusion, séparation, etc.).
2. Sur chaque plan où se développent des boucles de dislocation, un maillage Delaunay 2D est construit à l’aide de la bibliothèque libre CDT², en gérant éventuellement les intersections planes entre les différents coeurs de dislocation.
3. Des opérations d’intersection de maillage sont menées pour obtenir un maillage conforme surfacique représentant toutes les surfaces disloquées, comme illustré sur la figure 4. Enfin, après avoir généré une carte de taille de maille adaptée aux différentes hétérogénéités et aux coeurs des dislocations, les maillages automatiques SPATIAL sont employés une nouvelle fois pour générer un maillage tétraédrique conforme du modèle avec l’ensemble des précipités et des boucles de dislocations.

2. <https://github.com/artem-ogre/CDT>

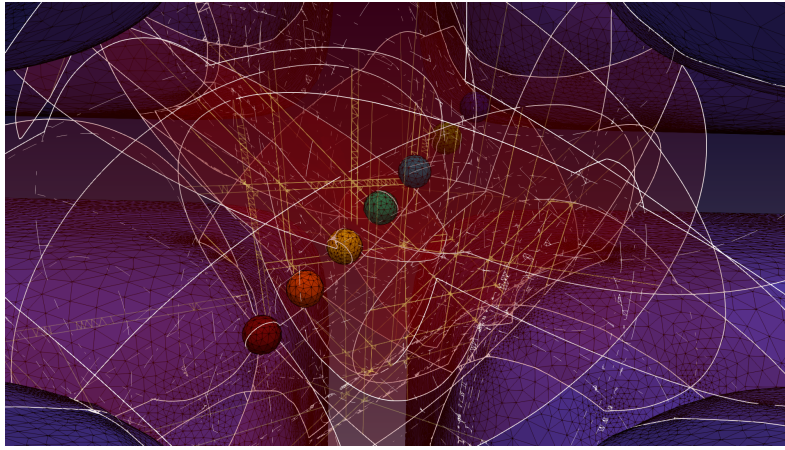


FIGURE 5 – Représentation par éléments finis d’un couloir de phase γ constitué de 80 boucles de dislocations (coeur en blanc et surfaces cisailées en rouge transparent) et 5 précipités γ tertiaires sphériques alignés au centre (dans la direction 111).

L’ensemble de notre démarche de discrétisation, mise en oeuvre dans le code A-set, permet de générer en quelques dizaines de secondes un maillage d’environ 1,6 millions de sommets, avec plusieurs dizaines de boucles de dislocation dans une microstructure multiéchelles composée de précipités γ secondaires et tertiaires, comme illustré sur la figure 5.

4 Résolution numérique

Les modèles éléments finis générés étant de grandes tailles, et en attente de la maturité suffisante d’A-set pour ces opérations, les capacités HPC de Z-set sont exploitées. L’approche classique Newton-Schur-Krylov est suivie et le solveur en décomposition de domaine AMPFETI [11] est utilisé pour résoudre le système tangent. La suite de la démarche reste similaire à celle exposée dans [8] : une fois la solution mécanique obtenue, un post-processing est mené le long des coeurs de chaque dislocation pour déterminer les forces de Peach-Koehler et en déduire la vitesse des dislocations par une loi classique de mobilité.

La figure 6 représente une première simulation de l’interaction entre une dislocation elliptique et des précipités γ tertiaires au milieu d’un couloir de nickel. Il s’agit d’un problème possédant 3,151 millions d’inconnues, résolu en 58,7s sur 48 sous-domaines et 96 coeurs. Le préconditionneur est *lumpé* et le test d’adaptivité est global. Le solveur itératif converge pour un résidu relatif à 10^{-5} en 67 itérations. Sur cette configuration, le post-traitement permettant le calcul des forces configurationnelles est réalisé sur 48 coeurs et 48 domaines en 24s.

5 Conclusion

Nous avons mis en oeuvre une approche dédiée à la modélisation des microstructures rencontrées dans les superalliages base nickel en vue d’étudier les phénomènes d’interaction se produisant entre les boucles de dislocation et les différentes morphologies de précipités rencontrés dans ces matériaux. Une première application visant l’obtention des solutions mécaniques sur des modèles de grande dimension a été réalisée, jusqu’au calcul des forces configurationnelles. Des résultats concernant l’étude des mécanismes de contournement seront présentés avec des sollicitations de chargement alternées représentatives d’un phénomène de fatigue.

Remerciements

Ce travail a reçu un soutien financier de la DGAC, de France relance et de l’Union européenne NextGenerationEU [subvention n° 2021-08, projet ARIZE].

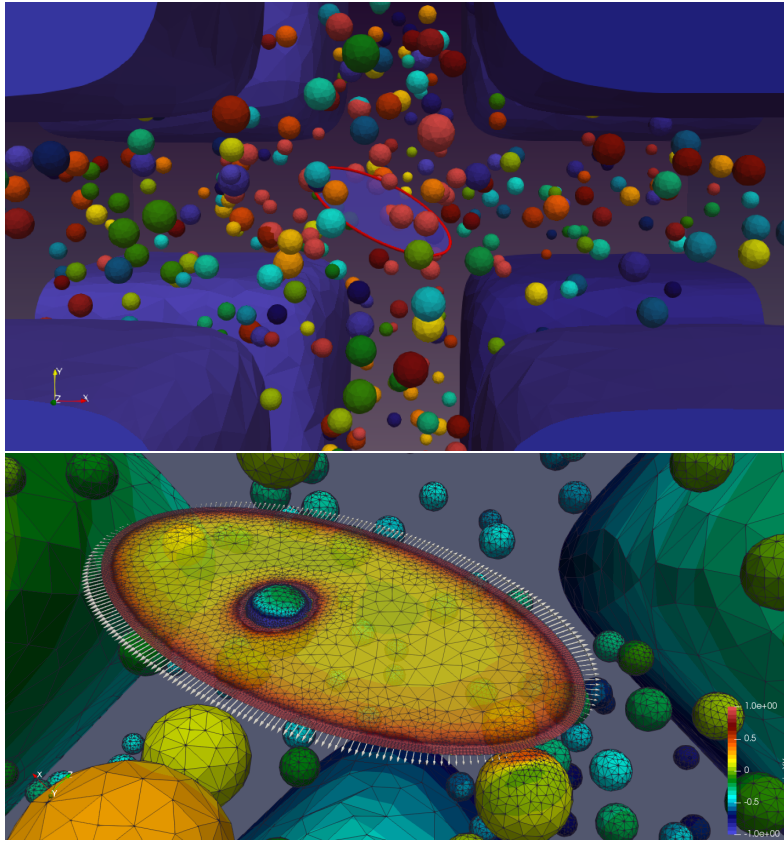


FIGURE 6 – Représentation d’une boucle de dislocation elliptique au milieu d’un couloir, en présence de 500 précipités γ tertiaires dans une microstructure sollicitée en compression, en haut, isovaleurs du champ de contrainte dans la direction du chargement imposé et vecteurs représentatifs des forces de Peach-Koehler (en gris) le long du coeur de la dislocation.

Références

- [1] M. P. Jackson and R. C. Reed, Heat treatment of UDIMET 720Li : the effect of microstructure on properties, *Materials Science and Engineering : A*, vol. 259, issue 1, pp. 85–97, 1999.
- [2] J.-R. Vaunois, J. Cormier, P. Villechaise, A. Devaux, and B. Flageolet, Influence of both γ' distribution and grain size on the tensile properties of UDIMET 720Li at room temperature, *Superalloy 718 and Derivative*, pp. 199–213, 2010.
- [3] J. Graverend, J. Cormier, M. Jouiad, F. Gallerneau, P. Paulmier, and F. Hamon, Effect of fine gamma prime precipitation on non-isothermal creep and creep-fatigue behaviour of nickel base superalloy MC2, *Material Science and Engineering : A*, vol. 527, issue 20, pp. 5295–5302, 2010.
- [4] S. Papanikolaou, H. Song, E. Van der Giessen, 2017. Obstacles and sources in dislocation dynamics : strengthening and statistics of abrupt plastic events in nanopillar. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 102, 17-29.
- [5] R. Sills, N. Bertin, A. Aghaei, W. Cai, 2018. Dislocation networks and the microstructural origin of strain hardening. *Physical review letters*, 121, 085501.
- [6] J. Cho, J.C. Crone, A. Arsenlis, S. Aubry, 2020. Dislocation dynamics in polycrystalline materials. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 28, 035009.
- [7] C. Chen, S. Aubry, T. Ooppelstrup, A. Arsenlis, E. Darve, 2018. Fast algorithms for evaluating the stress field of dislocation lines in anisotropic elastic media. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 26, 045007.
- [8] A. Vattré, V. Chiaruttini, Singularity-free theory and adaptive finite element computations of arbitrarily-shaped dislocation loop dynamics in 3D heterogeneous material structures, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Volume 167,104954,,2022.
- [9] Vattré, A., Demkowicz, M.J., 2013. Determining the Burgers vectors and elastic strain energies of interface dislocation arrays using anisotropic elasticity theory. *Acta Materialia*, 14, 5172-5187.

- [10] Vattré, A., 2015. Mechanical interactions between semicoherent heterophase interfaces and free surfaces in crystalline bilayers. *Acta Materialia* 93, 46-59.
- [11] Bovet C., Parret-Fréaud A., Gosselet P. Two-level adaptation for Adaptive Multipreconditioned FETI. *Advances in Engineering Software* 2021 ; 152 : 102952.