Couplage de codes éléments finis et dynamique discrète de dislocations

Vladislav Yastrebov, Georges Cailletaud, Frédéric Feyel

▶ **To cite this version:**

Vladislav Yastrebov, Georges Cailletaud, Frédéric Feyel. Couplage de codes éléments finis et dynamique discrète de dislocations. CSMA 2013 - 11ème colloque national en calcul des structures, May 2013, Giens, France. 2 p. hal-00868419

HAL Id: hal-00868419

https://minesparis-psl.hal.science/hal-00868419

Submitted on 1 Oct 2013

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.

CSMA 2013
11e Colloque National en Calcul des Structures
13-17 Mai 2013

Couplage de codes éléments finis et dynamique discrète de dislocations

Vladislav A. YASTREBOV[1], Georges CAILLETAUD[1], Frédéric FEYEL[2]

[1] Centre des Matériaux, MINES ParisTech, CNRS UMR 7633, vladislav.yastrebov@mines-paristech.fr, georges.cailletaud@mines-paristech.fr
[2] Onera, frederic.feyel@onera.fr

Résumé — Le calcul couplé entre la méthode des éléments finis et la dynamique discrète de dislocations est utilisé pour simuler le comportement cyclique d'un agrégat polycristallin. La convergence et la validation du couplage sont discutées.
Mots clés — couplage, dynamique discrète de dislocations, méthode des éléments finis, plasticité cristalline

1 Introduction

La plasticité cristalline est maintenant utilisée de façon régulière dans les calculs par éléments finis [2]. Dans le cas des polycristaux, elle permet de faire intervenir les orientations cristallines dans le calcul des champs locaux donc d'estimer les contraintes résiduelles intragranulaires. On a ainsi accès à l'hétérogénité des contraintes et des déformations au sein des grains, ainsi que, dans une certaine mesure, à l'effet des joints de grains et de la surface [3, 4]. Cependant ces estimations ne sont valables qu'en moyenne, et l'analyse de type mécanique des milieux continus n'est pas à même de capturer l'aspect discret qui découle des mécanismes de plasticité aux échelles les plus fines : c'est la création, la mobilité et l'interaction des dislocations qui gouvernent la déformation plastique. L'intégralité de ces phénomènes peut être simulée numériquement par des méthodes de type dynamique moléculaire, mais alors la taille du domaine comme la longueur du temps simulé sont réduites. Les méthodes de dynamique discrète de dislocation (DDD) sont moins gourmandes en ressources informatiques et permettent de simuler de plus grands domaines. On se propose donc de les mettre en œuvre pour obtenir les microstructures créées par des chargements cycliques. Pour rendre la simulation moins coûteuse nous complétons la DDD par la méthode des éléments finis (EF). Un couplage entre les deux méthodes permet de simuler une microstructure suffisament grande dans laquelle le comportement d'une petite zone d'intérêt sera simulée à l'aide de la DDD. Le code de calcul par éléments finis est le code ZSeT/ZéBuLoN [1], et le code de DDD est NuMoDiS [5].

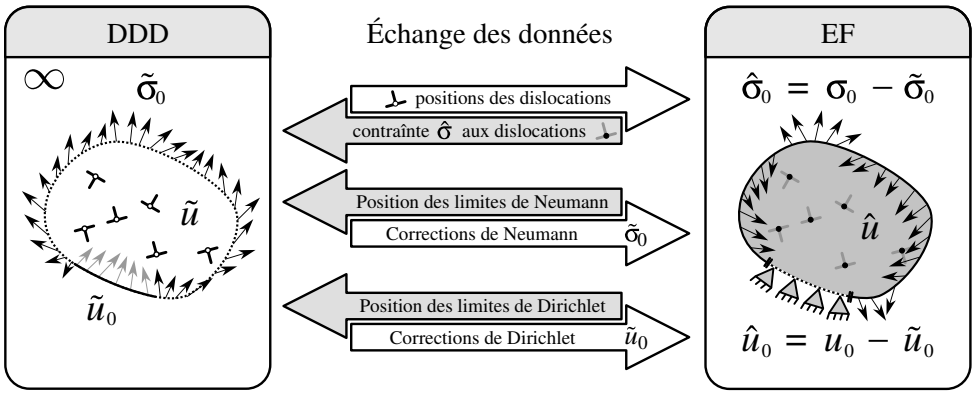

Fig. 1 – Échange des données entre le code EF et DDD. Le code DDD envoie l'information sur les positions des nœuds des dislocations, le code EF retourne les contraintes à ces nœuds, puis ils échangent entre eux les coordonnées des limites (Neumann et Dirichlet) et les corrections sur les conditions aux limites.

2 Méthodologie du couplage

Le couplage entre la DDD et les EF repose sur le principe de superposition de deux problèmes qui sont résolus pas à pas et qui échangent leurs résultats (Fig.1). La première étape consiste à résoudre un problème de mobilité des dislocations implantées dans un corps élastique infini. Cette résolution permet d'obtenir un champ de déplacement $\tilde{\mathbf{u}}$. La contrainte aux nœuds des dislocations est alors fournie par la résolution par EF du problème élastique pour la géométrie donnée avec des conditions aux limites corrigées par la présence des dislocations ; cela donne un champ de déplacement $\hat{\mathbf{u}}$. La solution du problème couplé est finalement donnée par la superposition de deux solutions : $\mathbf{u} = \tilde{\mathbf{u}} + \hat{\mathbf{u}}$.

Une validation poussée est essentielle dans ce genre de problème, car le couplage entre DDD et EF est faible, et qu'il n'y a pas de solution analytique de problème de taille significative. Le code DDD utilise une intégration explicite, et une représentation géométrique avancée des dislocations. Il importe d'établir les conditions de travail optimales, du point de vue des maillages, qui doivent être aptes à représenter les géométries des dislocations, et des pas de temps, qui peuvent être différents dans les deux codes.

3 Application : calcul d'un agrégat polycristallin

L'agrégat polycristallin est représenté d'une part par des grains en plasticité cristalline, et par un ou plusieurs grains en couplage EF+DDD. (Fig. 2). Cette configuration permet d'analyser le développement du réseau de dislocations, ainsi que l'influence des grains voisins (taille et orientation) sur la formation des bandes de glissement.

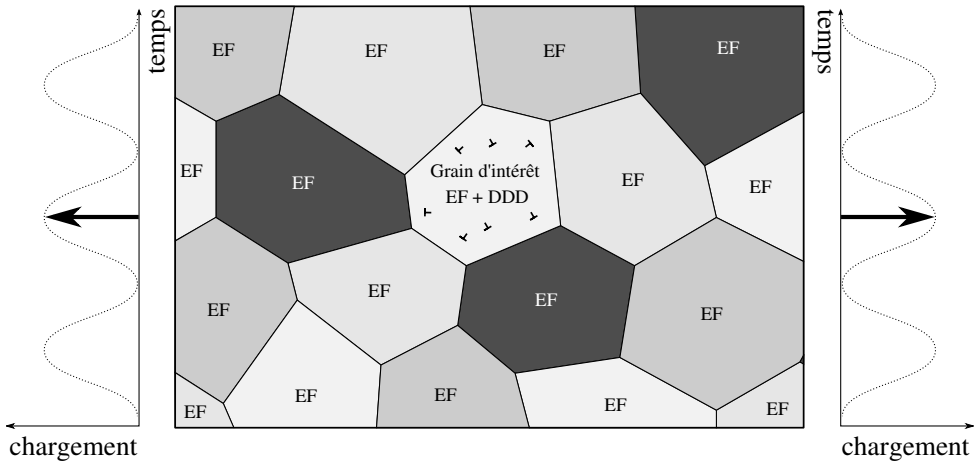

Fig. 2 – Problème-cible : une structure polycristalline dans laquelle un ou plusieurs grains sont simulés par les deux codes couplés EF+DDD, et le reste par le code EF.

Références

[1] J. Besson, R. Foerch. *Large scale object-oriented finite element code design*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, vol. 142, 165-187, 1997.

[2] G. Cailletaud, S. Forest, D. Jeulin, F. Feyel, I. Galliet, V. Mounoury, S. Quilici. *Some elements of microstructural mechanics*, Computational Materials Science, vol. 27, 351-374, 2003.

[3] O. Diard, S. Leclercq, G. Rousselier, G. Cailletaud. *Distribution of normal stress at grain boundaries in multicrystals : application to an intergranular damage modeling*, Computational Materials Science, vol. 25, 73-84, 2002.

[4] Y. Guilhem, S. Basseville, F. Curtit, J.-M. Stéphan, G. Cailletaud. *Numerical investigations of the free surface effect in three-dimensional polycrystalline aggregates*, Computational Materials Science, accepté pour publication, 2013.

[5] J. Soulacroix. *Modélisation multiéchelle de la plasticité cristalline : couplage de la méthode des éléments finis avec les modèles de dynamique des dislocations*, Rapport de stage, Grenoble SIMaP, http ://www.numodis.fr/download/2011_Master_Julian_SOULACROIX.pdf, 2011.