

# Une approche numérique générique pour la discrétisation des discontinuités surfaciques : application à la dynamique des boucles de dislocation

A. Vattré<sup>1</sup>, V. Chiaruttini<sup>2</sup>

<sup>1</sup> CEA, DAM, DIF, F-91297 Arpajon, France, aurelien.vattre@cea.fr

<sup>2</sup> Onera, Université Paris-Saclay, DMAS/MS2, 29 av Division Leclerc F-92320 Châtillon, France, vincent.chiaruttini@onera.fr

**Résumé** — Nous présentons une approche numérique générique pour la discrétisation d'interfaces complexes par la méthode des éléments finis. Basée sur l'utilisation d'algorithmes de maillages adaptatifs 3D, cette méthode permet l'étude mécanique de systèmes complexes (e.g., la mécanique de la rupture linéaire ou non-linéaire ou la présence de détails géométriques au sein de structures complexes comme la représentation des joints de grain et des porosités). Nous proposons de modéliser par cette approche l'évolution de boucles de dislocation, entités essentielles dans la mesure de la déformation plastique des matériaux, représentées par des surfaces mécaniquement chargées. Une comparaison des forces configurationnelles nécessaires à la propagation des boucles de dislocation avec des solutions analytiques est présentée.

**Mots clés** — boucles de dislocation, éléments finis, interfaces, remaillage.

## 1 Introduction

Les matériaux parfaits, ceux dont la maille cristalline élémentaire constitue idéalement un motif périodique dans la matière, ne se rencontrent jamais. Même dans les technologies de pointe, la recherche du matériau fonctionnel optimisé conduit à élaborer des matériaux architecturés comme des multi-couches structuraux, fortement hétérogènes et constitués d'interfaces solide/solide. Par ailleurs, les matériaux de rencontre, offerts par nature ou par des procédés complexes de mise en forme, possèdent également des défauts surfaciques de structure. Ces défauts bidimensionnels, comme les boucles de dislocation, les interfaces (joints de grain ou interfaces hétérophases), et les fissures, sont des entités qui jouent un rôle essentiel dans le comportement et la ruine des structures soumises à des chargements thermiques, mécaniques, radiatifs, etc. Afin de modéliser finement l'évolution microstructurale de ces matériaux, des outils numériques sophistiqués et génériques permettant de discrétiser les discontinuités surfaciques sont donc d'un grand intérêt en sciences des matériaux.

Les boucles de dislocation et les fissures sont deux objets pour lesquels un saut du champ de déplacement est présent au niveau d'une surface. Dans le cadre de la mécanique des milieux continus, les approches par éléments finis étendus (X-FEM) ou les approches par remaillage adaptatif permettent de mener des simulations numériques sur des structures fissurées sous des sollicitations thermo-mécaniques. Néanmoins, l'utilisation de ces mêmes approches pour l'étude des boucles de dislocation n'est pas habituelle : seuls quelques travaux ont été menés au milieu des années 2000 sur l'utilisation des méthodes X-FEM pour décrire les champs mécaniques et les forces motrices produites par des dislocations, principalement dans des milieux isotropes en deux dimensions [1].

Nous proposons dans cette étude d'exploiter des approches par remaillage adaptatifs 3D pour analyser l'évolution dynamique des boucles de dislocations dans un cadre générique. La partie suivante détaille la formulation générale du problème étudié, la section 3 décrit la procédure de calcul des forces configurationnelles et la loi de vitesse utilisée pour l'évolution des boucles de dislocation. La section 4 décrit la stratégie de discrétisation retenue, enfin la dernière section présente des premiers résultats de simulation numérique.

## 2 Description du problème mécanique

Considérons un milieu hétérogène  $\Omega$  (éventuellement fissuré) possédant une frontière extérieure  $\partial\Omega$  (cf. figure 1). Ce milieu est composé de  $n_g$  grains élastiques homogènes anisotropes  $\Omega_k$  tels que :

$$\Omega = \bigcup_k^{n_g} \Omega_k \quad (1)$$

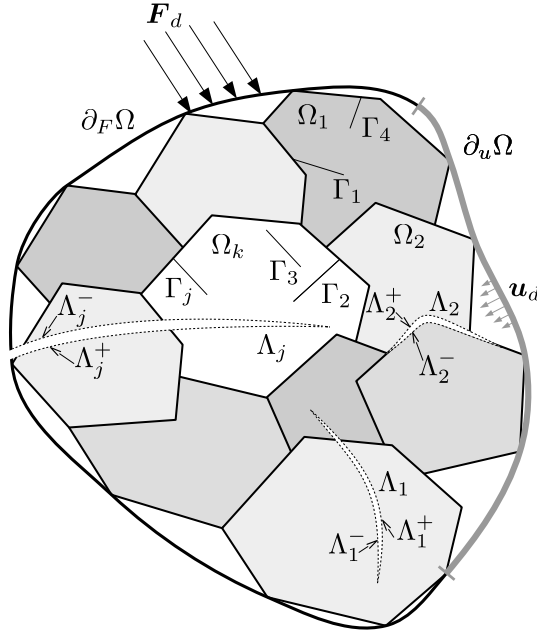


FIGURE 1 – Représentation du domaine polycristallin  $\Omega$  fissuré et disloqué, sous chargement mécanique extérieur.

Au sein du milieu est présent un ensemble de dislocations  $\Gamma$  tel que :

$$\Gamma = \bigcup_i^{n_d} \Gamma_i \quad (2)$$

où chaque dislocation  $\Gamma_i$  est représentée par une surface plane dans une orientation cristalline discrète de normale  $\mathbf{n}_i$  associée au grain dans laquelle elle est entièrement incluse, et sur laquelle est appliqué un saut de déplacement défini (en norme et direction) par un vecteur de Burgers  $\mathbf{b}_i$ .

Nous considérons également que  $n_f$  fissures  $\Lambda_j$  puissent être présentes dans ce milieu, de sorte que :

$$\Lambda = \bigcup_j^{n_f} \Lambda_j = \bigcup_j^{n_f} \Lambda_j^+ \cup \Lambda_j^- \quad (3)$$

Nous définissons  $N_j$  la normale extérieure de la lèvre inférieure  $\Lambda_j^-$  de chaque fissure. Sous l'action du chargement, ces fissures sont supposées ouvertes, et sans contact, de sorte d'une discontinuité du champ de déplacement est possible entre les lèvres  $\Lambda_j^{+/-}$ .

Sur la frontière  $\partial\Omega$  du milieu  $\Omega$  sont appliqués des chargements extérieurs sous la forme de déplacements imposés  $\mathbf{u}_d$  sur la partie  $\partial_u\Omega$ , et des efforts imposés tels que  $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{F}_d$  sur son complémentaire  $\partial_F\Omega$  de sorte que  $\partial\Omega = \partial_u\Omega \cup \partial_F\Omega$ .

Nous supposons que l'évolution d'un tel milieu puisse être décrite dans l'hypothèse des petites déformations, par la connaissance en tout point du milieu du champ de déplacement  $\mathbf{u}$  et du tenseur des

contraintes  $\sigma$  vérifiant le système d'équation suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot \sigma_k = \mathbf{0}, \text{ dans } \Omega_k \forall k \in \{1, \dots, n_g\} \\ \sigma_k = A : \varepsilon = A : \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u} + \nabla^T \mathbf{u}), \text{ dans } \Omega_k \forall k \in \{1, \dots, n_g\} \\ \sigma_k \cdot \mathbf{n}_{kl} = \sigma_l \cdot \mathbf{n}_{kl}, \text{ à chaque interface }_{kl} \text{ de normale } \mathbf{n}_{kl} \text{ entre grains contigus d'indices } k, l \\ [[\mathbf{u}_{kl}]] = \mathbf{0}, \text{ à chaque interface }_{kl} \text{ entre grains contigus d'indices } k, l \\ [[\mathbf{u}_i]] = \mathbf{b}_i, \text{ sur chaque dislocation } \Gamma_i \forall i \in \{1, \dots, n_d\} \\ \sigma \cdot \mathbf{n} = \mathbf{0}, \text{ sur } \Lambda_j \\ \sigma \cdot \mathbf{n} = \mathbf{F}_d, \text{ sur } \partial_F \Omega \\ \mathbf{u} = \mathbf{u}_d, \text{ sur } \partial_u \Omega \end{array} \right. \quad (4)$$

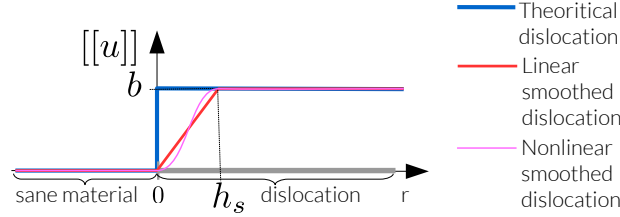


FIGURE 2 – Fonctions de lissage associées au cisaillement induit par la dislocation.

Afin d'imposer la cinématique représentative d'une boucle de dislocation et garder une formulation suffisamment régulière du problème, un lissage du saut de déplacement appliqué est défini au voisinage du front de dislocation. Par rapport à la représentation idéalisée discontinue du saut de déplacement au niveau du front de dislocation (courbe bleue dans la figure 2), nous introduisons deux lissages différents, définis ci-dessous :

$$f_L(r) = \begin{cases} 0 & \text{si } r \leq 0 \\ \frac{r}{h_s} & \text{si } 0 < r < h_s \\ 1 & \text{sinon} \end{cases} \quad f_{NL}(r) = \begin{cases} 0 & \text{si } r \leq 0 \\ 1 - \frac{(2(r-h_s)+3h_s)(r-h_s)^2}{h_s^3} & \text{si } 0 < r < h_s \\ 1 & \text{sinon} \end{cases} \quad (5)$$

où  $r$  représente la distance signée au front de dislocation ( $r > 0$  dans la surface disloquée), et  $h_s$  la longueur de lissage. Ces deux fonctions de régularisation  $f_L$  et  $f_{NL}$  sont représentées respectivement en rouge et magenta dans la figure 2.

### 3 Calcul des forces configurationnelles pour la propagation des boucles de dislocation

Dans cette partie, nous nous intéressons au calcul des forces motrices permettant de mener la propagation des dislocations à l'aide d'une loi de mobilité linéaire et explicite.

#### 3.1 Calcul des forces motrices

Suivant les principes fondamentaux de la thermodynamique, la force motrice théorique ressentie par une boucle de dislocation au point  $P$  (appartenant du front de la dislocation) isolée dans un milieu homogène, a été exprimée par Gavazza et Barnett [2]. Cette force  $F_i^{GB}$  s'écrit sous la forme :

$$\mathbf{F}_i^{GB}(P) \cdot \boldsymbol{\eta}_i = -\frac{1}{2} b_i n_j (\sigma_{ij}(P + e\boldsymbol{\eta}_i) + \sigma_{ij}(P - e\boldsymbol{\eta}_i)) + \frac{E(\alpha)}{\rho} \quad (6)$$

où le tenseur  $\sigma_{ij}$  correspond à la contrainte mesurée aux points  $(P + e\boldsymbol{\eta}_i)$  et  $(P - e\boldsymbol{\eta}_i)$  séparés par la distance  $2e$  afin d'éviter la singularité des solutions déterminées dans le cadre de l'élasticité linéaire et locale des dislocations. Par ailleurs,  $\boldsymbol{\eta}_i$  est la normale sortante au front de la dislocation,  $\rho$  son rayon de courbure locale et  $E$  un terme local lié à l'énergie élastique stockée par une dislocation infinie dans un milieu homogène. Ce dernier dépend du caractère de la dislocation exprimé par l'angle  $\alpha$ . Si le tenseur

$\sigma_{ij}$  se réduit à "self-contrainte", i.e. à la contrainte générée par la dislocation elle-même, alors la force motrice est aussi appelée tension de ligne dans la communauté de la dynamique classique des dislocations. Dans le cas plus général, des contributions supplémentaires peuvent être prises en compte : la contrainte appliquée au système, les contraintes internes (par exemple, celles générées par la présence par d'autres boucles et/ou par des interfaces/fissures environnantes), et les contraintes images (induites par la présence de surfaces libres et/ou du caractère hétérogène du matériau considéré, comme illustré dans figure 1). La force constituée de la tension de ligne et des contributions citées ci-dessous est également appelée force de Peach-Koehler. Une boucle de dislocation est alors à l'équilibre si cette force configurationnelle  $F_i^{GB}$  est nulle. Seuls les problèmes avec des géométries simples et particulières peuvent être traités par la théorie, e.g. le cas de plusieurs boucles circulaires et elliptiques dans un bimatériau semi-infini, élastique, et anisotrope [3]. Aussi, l'absence de régularité des solutions élastiques analytiques est également très discutable.

Dans le cadre d'une approche par la mécanique des milieux continus, la solution étant connue en tout point de l'espace, nous pouvons également mener une approche fondée sur le calcul des forces matérielles au niveau du front de dislocation. Ce type d'approche a été utilisée dans [1] pour la dislocation  $\Gamma_i$ , conduisant à un calcul d'intégrale de domaine conformément aux approches G- $\theta$  développées dans [4, 5]. D'après la mécanique linéaire de la rupture, cette force s'écrit

$$\mathbf{F} \cdot \boldsymbol{\eta}_i = G_{\theta_i} = \int_{\Omega} (\boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\varepsilon}) \nabla \cdot \boldsymbol{\theta}_i - (\boldsymbol{\sigma} \nabla \mathbf{u} : \nabla \boldsymbol{\theta}_i) d\Omega \quad (7)$$

où  $\boldsymbol{\theta}_i$  est un champ de vecteurs transformant le domaine au voisinage du front en respectant des propriétés spécifiées écrites dans [5]. En particulier, l'utilisation d'un support compact au voisinage du front est défini par  $R_{\theta_i}$ , à savoir la distance maximale au front où le champ  $\boldsymbol{\theta}_i$  est non-nul.

Il est important de noter que dans le cadre du calcul de la force de Peach-Koehler, une telle intégrale n'est pas totalement indépendante de la longueur  $R_{\theta}$ . En effet, la formulation de l'équation (7), n'est valable que si aucun chargement n'est présent à proximité du front de dislocation, ce qui n'est pas le cas dans la situation considérée. Néanmoins, il est possible d'obtenir une convergence de la force configurationnelle obtenue vers la force de Peach-Koehler, à condition d'utiliser un support suffisamment grand pour la fonction d'extension  $\boldsymbol{\theta}_i$ , comme le montre Belytschko et Gracie [1]. Dans une formulation discrète par éléments finis, cette convergence est validée dans la section suivante.

### 3.2 Propagation explicite des dislocations

À partir des forces motrices calculées pour toutes les dislocations, nous appliquons la loi de mobilité suivante, basée sur une viscosité uniforme [6] :

$$v_i = \frac{\mathbf{F} \cdot \boldsymbol{\eta}_i}{B} \quad (8)$$

avec  $B$  un coefficient de frottement visqueux. En pratique, cette loi est employée en utilisant une discrétisation temporelle explicite tant que la force de Peach-Koehler produit une vitesse de glissement supérieure à un seuil. Cette condition permet d'obtenir une solution considérée à l'équilibre à convergence.

## 4 Discrétisation par éléments finis

Dans cette section, nous détaillons l'approche retenue pour la résolution discrète des équations d'équilibre mécanique (4) et de mobilité des dislocations (8). Par rapport aux travaux [1], nous utilisons une approche fondée sur la représentation explicite des interfaces par des stratégies de remaillage adaptatif [7] au sein du code Z-set/Zebulon [8].

### 4.1 Problème d'équilibre mécanique discrétisé

Le problème considéré est résolu à l'aide d'une approche numérique par éléments finis. L'hétérogénéité du matériau est caractérisée par la définition de groupe d'éléments où est défini un comportement

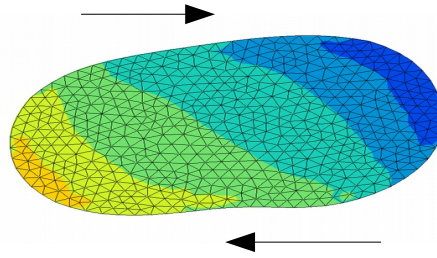


FIGURE 3 – Discrétisation d'une boucle de dislocation par des éléments triangulaires où un cisaillement  $[[u_1]] = b_1$  est imposé entre les surfaces supérieure et inférieure.

matériel éventuellement anisotrope, possédant une orientation cristalline spécifique avec des interfaces imperméables à la propagation des dislocations. Les boucles de dislocations sont représentées par des surfaces planes discrétisées à l'aide d'éléments triangulaires (cf. figure 3), en utilisant un raffinement au voisinage du front. Les fissures sont également modélisées par des surfaces, mais elles ne sont pas nécessairement confinées au sein d'un unique grain.

## 4.2 Remaillage adaptatif et propagation

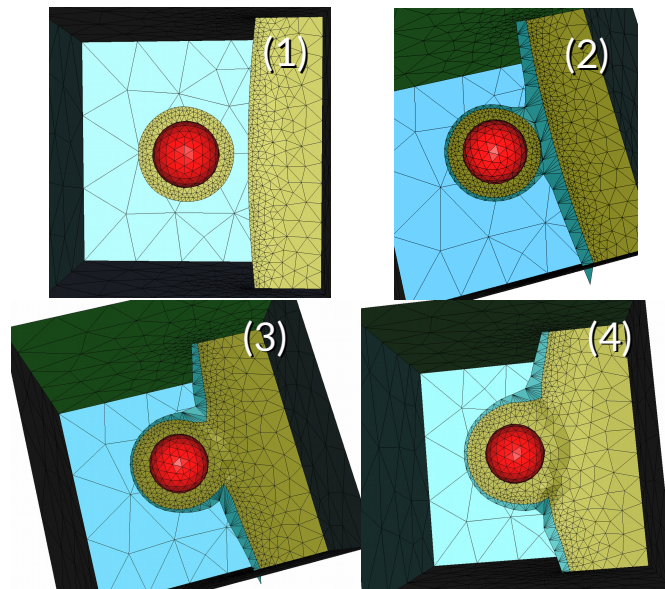


FIGURE 4 – Représentation des maillages surfaciques "étendus" lors de la simulation de la coalescence de deux fissures à proximité d'une inclusion sphérique.

Pour la partie propagation, nous nous basons sur les algorithmes de remaillage adaptatif développés pour la fissuration 3D. Ces approches permettent de traiter l'extension, plane ou non, de lèvres de fissure dans des géométries complexes où des phénomènes de coalescence peuvent se produire (cf. figure 4). À chaque pas de propagation, nous générons une triangulation représentant un incrément d'avancée de fissure lié à la discrétisation temporelle du problème et aux vitesses de propagation mises en jeu. Ensuite, des corrections géométriques locales sont menées pour traiter les aspects liés aux coalescences, intersections surfaciques ou courbures concaves.

A l'instar des fissures qui ne peuvent que s'étendre, l'évolution majeure algorithmique (afin d'adapter ces approches à la dynamique des dislocations) est principalement liée à la possibilité de rétrécissement des surfaces considérées. Pour permettre le remaillage dynamique des surfaces, où se produisent localement des rétrécissements comme des extensions le long du front de dislocations, une approche par morphing est utilisée dans les zones de rétrécissement. Cette technique, automatiquement adaptée aux tailles de maille locale et aux longueurs de déplacement requises, est nécessaire pour modéliser l'évolution des dislocations qui glissent dans des plans cristallographiques discrets et définis.

## 5 Simulation numérique – validation de la tension de ligne en milieu isotrope infini

Ce cas concerne la validation de la solution déterminée par éléments finis en 3D face à une solution analytique classique [2]. On considère un milieu homogène infini possédant un comportement linéaire élastique isotrope (de module d'Young  $E = 2.6$  et coefficient de Poisson  $\nu = 0.3$ ), où est présente une boucle de dislocation de normale  $\mathbf{u}_y$  et de rayon  $r = 10$ , chargée en cisaillement par un vecteur de Burgers  $\mathbf{b} = 1 \mathbf{u}_x$ .

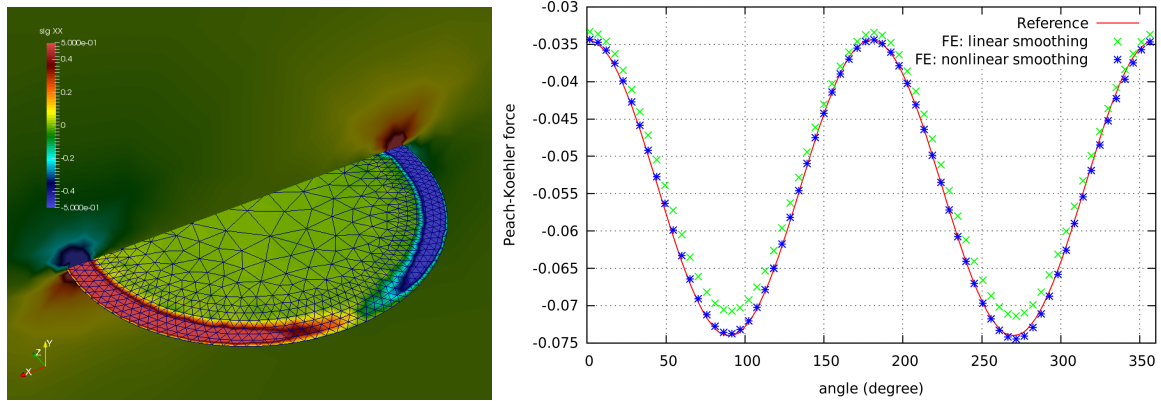


FIGURE 5 – à gauche : représentation des isovaleurs du champ de contrainte  $\sigma_{xx}$  sur une boucle de dislocation en milieu infini isotrope ; à droite : comparaison du calcul des forces de Peach-Koehler sur la même boucle de dislocation, entre une approche analytique (rouge), une solution EF avec lissage linéaire (points verts), et une solution EF avec lissage non-linéaire (points bleus).

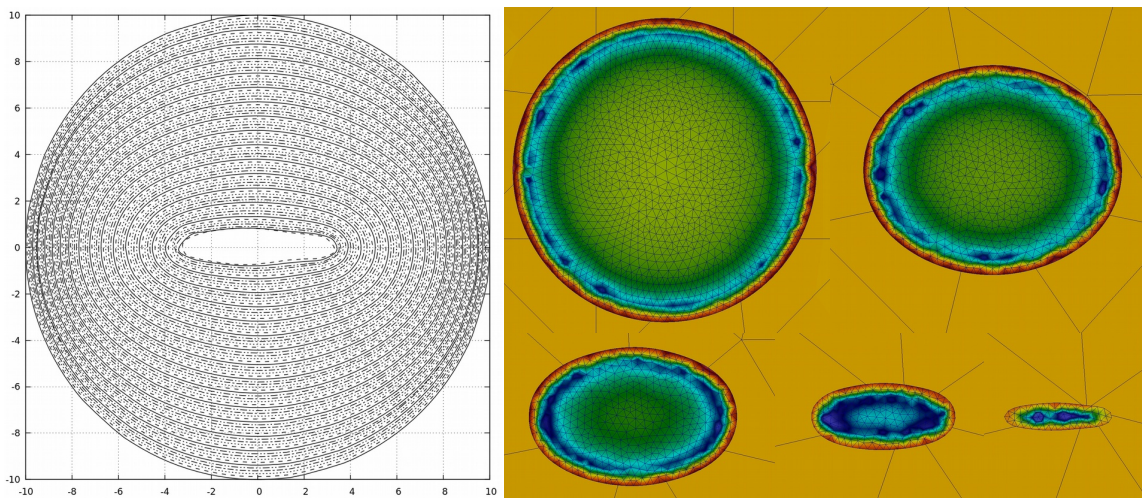


FIGURE 6 – à gauche : représentation des fronts successifs de la boucle de dislocation étudiée ; à droite : quelques maillages et les isovaleurs d'une composante des contraintes de cisaillement obtenus pendant la simulation du rétrécissement.

Pour mener la simulation numérique, nous avons utilisé un maillage composé de 29 530 éléments tétraédriques linéaires produisant un système composé de 18 135 inconnues. La figure 5 illustre qualitativement le type de champ obtenu et compare les valeurs de la force motrice calculée à l'aide des deux fonctions de lissage envisagées. Pour obtenir une discrétisation satisfaisante, une taille de maille minimale  $h = 0.5$  a été choisie par rapport à la longueur de lissage  $h_s = 1 = 2h$ . En choisissant un rayon de support de la fonction d'extension  $R_\theta = 2.5 = 5h$ , et en imposant une taille de maille minimale sur la dislocation à l'intérieur du support, nous assurons une bonne concordance avec la solution élastique analytique.

Afin de valider les algorithmes mis en place pour le rétrécissement (même local) des surfaces dis-

loquées, nous avons laissé évoluer la boucle en milieu infini en utilisant la loi de vitesse (8). Un pas de temps variable est déterminé pour assurer un incrément de propagation maximal au point avançant le plus vite sur l'ensemble du front de la boucle de dislocation. Dans la simulation menée, l'incrément maximal est fixé à  $h/2 = 0.25$ , ce qui produit un total de 85 remaillages pour la totalité de la propagation, et une trentaine de minutes de calcul sur un laptop. En pratique, la simulation s'arrête lorsque la taille de la boucle devient trop petite par rapport à la norme du vecteur de Burgers. La figure 6 illustre les résultats de la simulation numérique ainsi obtenue. Notre approche est donc capable de modéliser la tension de ligne d'une boucle de dislocation pour laquelle la portion de la ligne "vis" est plus rigide que la portion de ligne de caractère "coin". Ainsi, la boucle de dislocation rétrécit plus facilement dans la direction "vis", direction normale au cisaillement imposé selon  $u_x$ .

## 6 Conclusion

Nous avons mis en œuvre une approche générique pour l'étude des problèmes d'interfaces complexes dans les matériaux et structures, à l'aide de la méthode des éléments finis associée à des stratégies de remaillage adaptatif.

Cette méthode permet d'étudier une grande variété de problématique et a été ici appliquée à l'étude des boucles de dislocation et leur évolution dynamique. Les premières validations ont montré la pertinence d'une telle approche pour des situations 3D, où des comparaisons entre les grandeurs énergétiques obtenues par intégrale de domaine sur les solutions éléments finis (avec des discrétisations peu coûteuses en temps de calcul) et des solutions analytiques sont prometteuses.

Les perspectives ouvertes par ce type d'approche sont nombreuses. Elles peuvent s'appliquer aux interactions entre les boucles de dislocation, ainsi que leurs interactions avec des joints de grain et/ou fissures. Des simulations plus ambitieuses telles que plusieurs centaines de boucles de dislocation dans des microstructures polycrystallines sont envisageables. Ce travail pourrait par ailleurs bénéficier des nouveaux algorithmes de résolutions parallèle développés à l'Onera [9], sur des problèmes avec remaillage possédant plusieurs dizaines de millions d'inconnues.

## Références

- [1] T. Belytschko, R. Gracie. On XFEM applications to dislocations and interfaces. *International Journal of Plasticity*, 23, 1721-1738, 2007.
- [2] S.D. Gavazza, D.M. Barnett. The self-force on a planar dislocation loop in a anisotropic linear-elastic medium. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 24, 171-185, 1976.
- [3] A. Vattré, E. Pan. Three-dimensional interaction and movements of various dislocations in anisotropic bicrystals with semicoherent interfaces. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 116, 185-216, 2018.
- [4] J.R. Rice. A path independent integral and the approximate analysis of strain concentrations by notches and cracks. *Journal of Applied Mechanics*, 35, 379-386, 1968.
- [5] P. Destuynder, M. Djaoua, S. Lescure. Quelques remarques sur la mécanique de la rupture élastique. *Journal de Mécanique Théorique et Appliquée*, 2, 113-135, 1983.
- [6] J.R. Hirth, L. Lothe. *Theory of dislocations*, Second Edition. Malabar, Florida : Krieger, 1992.
- [7] V. Chiaruttini, D. Geoffroy, V. Riolo, M. Bonnet. An adaptive algorithm for cohesive zone model and arbitrary crack propagation. *European Journal of Computational Mechanics*, 21, 208-218, 2012.
- [8] F. Feyel. Some new technics regarding the parallelisation of zébulon, an object oriented finite element code for structural mechanics. *Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 36, 923-935, 2002.
- [9] C. Bovet, A. Parret-Fréaud, P. Gosselet, N. Spillane, Adaptation à deux niveaux pour le solveur Adaptive Multipreconditioned FETI, soumis à 14ème Colloque National en Calcul de Structure, CSMA 2019.