

Comportement mécanique par homogénéisation de la dynamique des dislocations

A. Ghorbel, R. Monneau et **M. El Rhabi** *CERMICS Équipe EDP & Matériaux, ENPC 6 et 8 avenue Blaise Pascal Cité Descartes - Champs sur Marne 77455 Marne la Vallée Cedex 2 Téléphone : 01 64 15 36 63, Télécopie : 01 64 15 35 86 Adresse(s) électronique(s) : elrhabi@cermics.enpc.fr*

Mots clés : dislocations, mur de dislocations, homogénéisation numérique, équations d'Hamilton Jacobi.

1 Introduction

La plasticité des métaux est principalement due à la présence de lignes de défauts appelées dislocations. En ce qui concerne la déformation plastique des cristaux, elle résulte principalement du déplacement de ces dislocations, dont l'ordre de longueur typique dans les métaux est 10^{-6} m et l'épaisseur 10^{-9} m.

Dans cette étude, on considère la dynamique collective des dislocations en interactions. Dans ces conditions, les dislocations se regroupent en « murs » pour former des structures ordonnées à longue distance.

Dans cette note, on présente un modèle simple de dynamique de murs de dislocations coins de vecteurs de Burgers $\pm \vec{b}$. La dynamique des dislocations pour ce modèle est décrite par un système à deux inconnues (les dislocations $+$ ou $-$) de deux équations de transport dont la vitesse est donnée par la force de Peach-Koehler contenant les contributions de toutes les dislocations, même à longue distance. Il s'agit ainsi d'un système d'équations Hamilton-Jacobi non locales. Nous calculons alors numériquement les vitesses moyennes des dislocations $+$ ou $-$ en fonction des contraintes imposées. Ceci nous permet de retrouver une loi de comportement du type $\dot{\epsilon}^p = f(\sigma)$, où ϵ^p désigne le tenseur des déformations et σ le tenseur des contraintes.

Cette contribution s'articule comme suit. La section 2 rappelle le modèle et les équations le régissant. La section 3 présente les principaux résultats numériques. Enfin, nous en donnerons sommairement quelques perspectives dans la section 4.

2 Description du modèle

On considère un cristal tridimensionnel supposé soumis à une contrainte extérieure (lamination, température ...). Les plans de glissement de ce matériau sont supposés parallèles au plan (xz) dans un repère (Oxyz) de l'espace (voir figure 1). La distance entre deux plans de glissement est imposée constante et notée ε , telle que $0 < \varepsilon < 1$ (voir figure 1). Dans chacun de ces plans de glissement, on considère des lignes de dislocations droites et parallèles à l'axe (Oz), réparties uniformément. On suppose alors l'existence de dislocations de vecteur de burgers $+\vec{b}$ (notées dislocations $+$) et des dislocations de vecteur de burgers $-\vec{b}$ (notées dislocations $-$), avec $\pm \vec{b}$ parallèle à (Ox).

En considérant une coupe suivant le plan (xy), ces lignes de dislocations se réduisent à des points. Sur l'axe parallèle à (Ox), la dynamique de ces dislocations évolue en fonction d'une part, des sollicitations extérieures et d'autre part, en fonction des interactions entre dislocations du même type et des frottements entre dislocations de type opposé (voir figure 2).

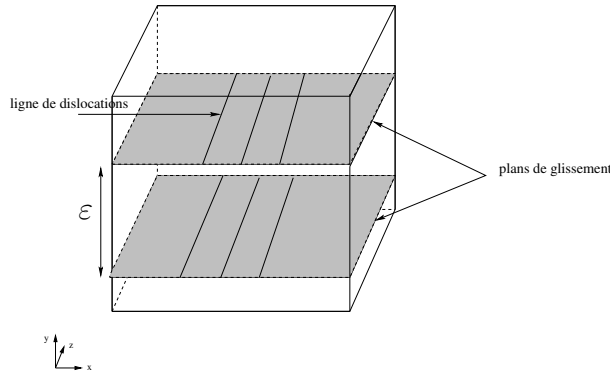


FIG. 1 – Le domaine 3D

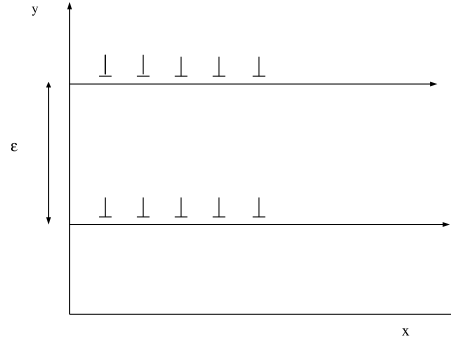


FIG. 2 – Coupe 2D correspondant aux dislocations suivant $+\vec{b}$.

2.1 Le modèle

En supposant que la distribution des dislocations est ε -périodique par rapport à l'axe (Oy) et que le nombre de dislocations de type + est égal au nombre de type -, on peut alors se ramener à l'étude du problème unidimensionnel donnée par les équations d'Hamilton-Jacobi non-locales suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u^+}{\partial t}(x, t) + c[u^+, u^-] \left| \frac{\partial u^+}{\partial x}(x, t) \right| = 0 \text{ dans } \mathbb{R} \times (0, +\infty), \\ \frac{\partial u^-}{\partial t}(x, t) - c[u^+, u^-] \left| \frac{\partial u^-}{\partial x}(x, t) \right| = 0 \text{ dans } \mathbb{R} \times (0, +\infty), \\ c[u^+, u^-] = (\sigma^{ext} + c_0 \star [E[u^+(\cdot, t)] - E[u^-(\cdot, t)]]) \end{array} \right. \quad (1)$$

où $E[.]$ désigne la fonction partie entière, u^+ (resp. u^-) est une fonction scalaire (non physique) dont les sauts de partie entière repèrent les positions des dislocations de type + (resp. -). Par exemple, si $u^+(x, t) = Px$, $P \in \mathbb{N}^*$, les dislocations sont repérées par les positions $x_i^+ = \frac{i}{P}$, $i \in \mathbb{Z}$.

σ^{ext} représente la contrainte extérieure supposée constante et c_0 est une fonction pair, à moyenne nulle, qui décrit les interactions entre dislocations.

2.2 Les conditions initiales et les hypothèses du modèle

Pour la position du problème 1, on suppose que les solutions vérifient :

$$(H1) \quad u^\pm(x, t) = u^{\pm, per}(x, t) + \rho x,$$

où $u^{+, per}(x, t)$ (resp. $u^{-, per}(x, t)$) est fonction 1-périodique. ρ étant la densité de dislocations de type + ou - par unité de longueur suivant l'axe (Ox). On considère le système défini par (1) avec les conditions initiales : $u^\pm(x, 0) = u_0^\pm(x)$ vérifiant (H1).

Dans le cas où $u^- = 0$, et avec des conditions initiales vérifiant (H1), l'existence et l'unicité de solution du problème (1) ont été établies en temps court dans (Ghorbel et Monneau, 2005) et pour tout temps dans (Ghorbel et Monneau, en cours).

Ici, on s'intéresse à la compréhension de la dynamique de murs formés par les dislocations de même type, ainsi qu'à son homogénéisation numérique (en temps) et plus particulièrement aux frottements entre dislocations de type opposé.

2.3 L'homogénéisation

Si on pose :

$$u_{\delta}^{\pm}(x, t) = \delta u^{\pm}\left(\frac{x}{\delta}, \frac{t}{\delta}\right) \quad (2)$$

avec u^+ et u^- sont des solutions du problème (1). Formellement, on s'attend à ce que u_{δ}^+ (resp. u_{δ}^-) converge, quand $\delta \rightarrow 0$, vers $\bar{u}^+(x, t)$ (resp. $\bar{u}^-(x, t)$) vérifiant des équations homogénéisées du type :

$$\frac{\partial \bar{u}^{\pm}}{\partial t} = \bar{H}^{\pm}(\sigma^{ext}, \frac{\partial \bar{u}^+}{\partial x}, \frac{\partial \bar{u}^-}{\partial x}), \quad (3)$$

où \bar{H}^{\pm} sont des hamiltoniens effectifs et $\frac{\partial \bar{u}^+}{\partial x}$, ici, représentent les densités de dislocations. Lorsque $\frac{\partial \bar{u}^+}{\partial x} = \frac{\partial \bar{u}^-}{\partial x} = \rho$, l'équation (3) permet alors de déduire une loi de comportement dans un matériau macroscopique :

$$\dot{\epsilon}^p = \tilde{H}(\sigma^{ext}, \rho). \quad (4)$$

où $\tilde{H} = 2\bar{H}(\sigma^{ext}, \rho, \rho)$, $\bar{H} = \bar{H}^{\pm}$ et ϵ^p , la déformation plastique représentée par $\bar{u}^+ + \bar{u}^-$.

2.4 Calcul de la fonction c_0

Dans le cas de dislocations coins et dans un matériau isotrope, la contrainte en cisaillement σ_{xy} , créée par une dislocation, est donnée par (voir (Hirth et Lothe, 1982) page 76) :

$$\sigma_{xy} = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}$$

où μ et ν sont respectivement les constantes de Lamé et de Poisson. b est la norme du vecteur de Burgers.

Maintenant, si l'on considère les différentes interactions par sommation des contributions individuelles le long du mur de dislocations on obtient alors la contrainte (voir (Hirth et Lothe, 1982), page 732) :

$$\sigma_{xy}(x, y) = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \sum_{k \in \mathbb{Z}} \frac{x(x^2 - (y - k\varepsilon)^2)}{(x^2 + (y - k\varepsilon)^2)^2}$$

ou encore, si l'on pose $X = \frac{x}{\varepsilon}$ et $Y = \frac{y}{\varepsilon}$

$$\sigma_{xy} = \frac{\mu b \pi X (\cosh(2\pi X) \cos(2\pi Y) - 1)}{\varepsilon(1-\nu)(\cosh(2\pi X) - \cos(2\pi Y))^2},$$

Le noyau c_0 est alors donné par la relation :(5).

$$c_0(x) = \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial x}(x, 0).$$

3 Simulations Numériques

Dans cette section, nous présentons les résultats de simulations pour estimer la fonction \tilde{H} introduite par (3). Les équations du problème (1) sont résolues numériquement par un schéma aux différences finies de type "upwind" (voir par exemple (Rouy et Tourin, 1992)). L'hamiltonien numérique effectif \tilde{H}^{num} est alors calculé en regardant l'évolution en temps long des solutions de (1) ce qui est, en fait, équivalent au passage à la limite dans (2).

La figure 3 représente le graphe de l'hamiltonien effectif \tilde{H} en fonction de σ^{ext} , la contrainte extérieure, pour différentes données initiales u_0^\pm . Pour les simulations, la densité de dislocations type \pm est fixée à $\rho = 4$. On obtient alors des hamiltoniens numériques antisymétriques. De plus, il apparaît clairement deux valeurs seuils (opposées) $\sigma_0 = 0.09$ et $-\sigma_0$ au delà desquelles l'hamiltonien n'est pas nul. Pour des valeurs de σ^{ext} du même ordre de grandeur que celles du terme décrivant les interactions entre dislocations, l'hamiltonien passe par un régime "transitoire" (de l'état de "piégeage" au "mouvement") pour atteindre lorsque $|\sigma^{ext}| \gg \sigma_0$, un état où l'hamiltonien devient alors proportionnel à σ^{ext} , ce qui correspond à un mouvement conservatif de dislocations (dans ce test on a supposé qu'il n'y a pas de sources de dislocations). En outre, au vu de ces simulations, il semble que les résultats concernant l'hamiltonien effectif numérique \tilde{H} soient peu dépendants des conditions initiales choisies.

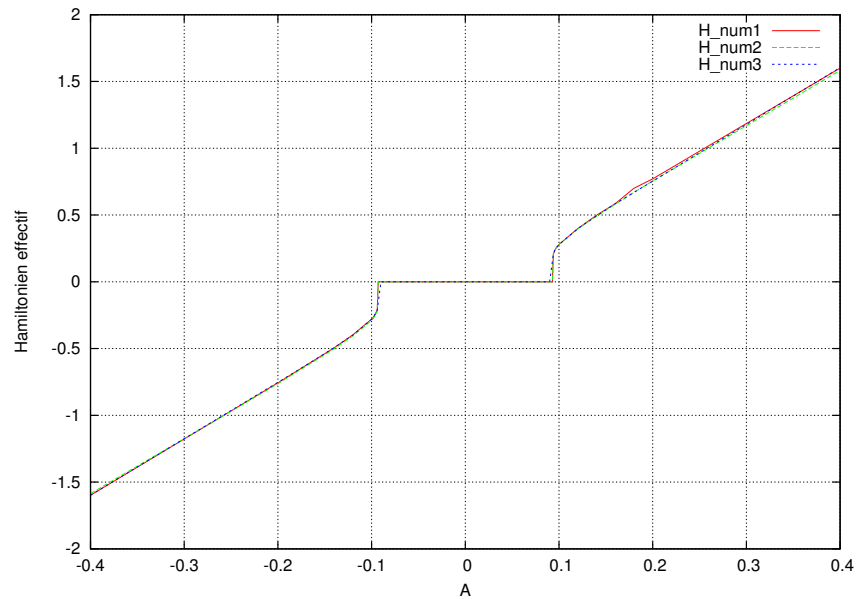


FIG. 3 – Le graphe de l'hamiltonien effectif en fonction de la contrainte σ^{ext} ; $\dot{\epsilon} = \tilde{H}(\sigma^{ext}, \rho)$ pour $\rho = 4$

4 Perspectives

Nous envisageons d'approfondir ce modèle et de considérer les liens avec d'autres modèles à partir de la littérature de la physique des densités de dislocations (par exemple le modèle de Groma-Balogh) et celle de la mécanique.

5 Remerciements

Nous remercions Philippe Hoch, ingénieur de Recherche au CEA, pour nos nombreuses discussions enrichissantes.

REFERENCES

Ghorbel A. & Monneau R., "Équation d'Hamilton-Jacobi non locale modélisant la dynamique des dislocations.", *Proceedings of the 2nd TAM-TAM, (Trends in Applied Mathematics in Tunisia, Algeria, Morocco)*,(2005), pp. 322-328.
 Ghorbel A. & Monneau R., "Well-posedness of a non-local transport equation modelling dislocations dynamics.", *Paper in progress*.
 Hirth J.P. & Lothe J., "Theory of dislocations", *Second Edition, Krieger Publishing compagny Malabar, Florida 32950*, (1982).
 Rouy E. & Tourin A., "A viscosity solutions approach to shape-from-shading.", *SIAM J. Numer. Anal.*, **23**, 3, (1992), pp. 867-884.