

Cadre thermodynamique tensoriel pour la modélisation de la mise radeaux des superalliages monocristallins base Nickel et couplage avec l'endommagement

A. MATTIELLO^{a,c}, R. DESMORAT^a, J. CORMIER^b, T. ROSE^d

a. LMT-Cachan (ENS Cachan, UMR CNRS 8535, Université Paris Saclay), 94235 Cachan,
France

mattiello@lmt.ens-cachan.fr, desmorat@lmt.ens-cachan.fr

b. Institut P', UPR CNRS 3346, ISAE-ENSMA, 86961 Futuroscope-Chasseneuil, France
jonathan.cormier@ensma.fr

c. Safran Helicopter Engines, 64510 Bordes - France

d. Safran Tech • Pole Modélisation et Simulation • Rue des Jeunes bois – Chateaufort –
CS80112-78772 Magny-les-Hameaux – France
tonya.rose@safrangroup.com

Résumé :

Un modèle 3D de viscoplasticité couplée avec les évolutions microstructurales et l'endommagement est proposé pour les superalliages monocristallins base Nickel. Les évolutions microstructurales de type coalescence isotrope et mise en radeaux de la phase durcissante γ' sont modélisées par une loi d'évolution tensorielle de la largeur des couloirs de matrice, formulée dans la base naturelle d'anisotropie du matériau et à l'échelle de l'élément représentatif de volume. Cette écriture est naturellement adaptée à une formulation de la viscoplasticité en modes de Kelvin. De manière cohérente avec la viscoplasticité cristalline, deux fonctions critères sont proposées afin de prendre en compte les deux types de glissement engendrant la plasticité, les glissements cubiques et les glissements octaédriques, et de représenter l'anisotropie de la réponse mécanique sous chargement désorienté. Les effets des évolutions microstructurales sur la réponse viscoplastique du matériau sont introduits dans les critères de viscoplasticité via la contrainte d'Orowan. Une loi d'endommagement de type Lemaitre avec seuil est proposée pour la modélisation du fluage tertiaire et pour la prévision de la ductilité en traction. Le modèle est aujourd'hui identifié sur le CMSX-4 à 1050°C. Il a été implanté dans le code EF ZéBuLon. Des calculs de structures sont présentés.

Abstract :

A 3D model coupling viscoplasticity, microstructural evolutions and damage has been developed for Ni-base single crystal superalloys (at 1050°C). The rafting and coarsening of the hardening phase γ' have been modeled via a tensorial evolution law of the matrix γ channels width in the natural anisotropy basis of the material and at the representative elementary volume scale. This type of formulation is naturally suitable for a Kelvin mode based formulation of viscoplasticity. Coherently

with crystal plasticity, two criterion functions have been introduced: one accounting for the plasticity developed by octahedral slips and another one for the plasticity developed by cubic slips. The coupling between the microstructural evolutions and the viscoplasticity has been realized by means of Orowan stress in both criterions. The tertiary creep and the softening during monotonic tension have been modeled by an incremental damage law. The model has been identified for the CMSX-4 and it is operative for structural computations under any crystallographic orientation.

Mots clefs: Superalliages monocristallins base Nickel ; évolutions microstructurales ; fluage ; anisotropie.

1 Introduction

Les superalliages monocristallins base Ni sont des superalliages à durcissement structurelle dont la composition chimique et la microstructure sont optimisées pour limiter la déformation plastique produite aux hautes températures ($T > 750^\circ\text{C}$). Ils sont alors utilisés pour réaliser les aubes de turbines à haute pression des moteurs d'hélicoptères. Cependant, aux températures supérieures à 900°C et à cause du chargement mécanique, la microstructure évolue et cette évolution engendre une dégradation de la tenue mécanique. La prise en compte de l'impact de ces évolutions microstructurales sur la réponse du matériau devient alors prioritaire pour la prévision du comportement et de la durée de vie des composants réalisés avec cette classe de matériaux.

2 Hypothèse et équations du modèle

La formulation des lois de comportement est faite à l'échelle de l'élément de volume (VER) dans la base naturelle d'anisotropie du matériau (BNA), en s'appuyant sur la décomposition en mode de Kelvin du tenseur d'élasticité d'un matériau cubique [1,2]. Pour la symétrie cubique, notent \mathbb{P}^d et $\mathbb{P}^{\bar{d}}$ les projecteurs de Kelvin [1], la partition objective du déviateur de contraintes $\boldsymbol{\sigma}' = \boldsymbol{\sigma}^{\bar{d}} + \boldsymbol{\sigma}^d$, $\boldsymbol{\sigma}^d \stackrel{\text{def}}{=} \mathbb{P}^d : \boldsymbol{\sigma}$, $\boldsymbol{\sigma}^{\bar{d}} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbb{P}^{\bar{d}} : \boldsymbol{\sigma}$, en « déviateur diagonal » (dans la BNA) et en « déviateur non diagonal » (dans la BNA) est utilisée de manière cohérente avec la viscoplasticité cristalline (multicritère par nature [3]). Deux fonction critères anisotropes, plus précisément cubiques, f_1 et f_2 [4], sont alors introduites (Eq. (1)).

$$f_1 = \sigma_{\text{Hill}} - R_\infty - \frac{\kappa_{\text{OROG}} G}{\|\boldsymbol{\omega}\|} - \sigma_y \quad f_2 = \|\boldsymbol{\sigma}^{\bar{d}}\|_a - \bar{R}_\infty - \bar{\sigma}_y - \varpi \frac{\kappa_{\text{OROG}} G}{\|\boldsymbol{\omega}\|} \quad (1)$$

La première dépend de la contrainte équivalente d'Hill dans le cas cubique σ_{Hill} définie dans l'Eq. (2) (avec h un paramètre scalaire). La deuxième dépend de la « norme a » (Eq. (3), $a < 2$), du « déviateur non diagonal » $\boldsymbol{\sigma}^{\bar{d}}$, afin d'introduire correctement l'effet de multiaxialité y compris en traction-torsion [4].

$$\sigma_{\text{Hill}} = \sqrt{\frac{3}{2} \left(\boldsymbol{\sigma}^d : \boldsymbol{\sigma}^d + h^2 \boldsymbol{\sigma}^{\bar{d}} : \boldsymbol{\sigma}^{\bar{d}} \right)} \quad (2)$$

$$\|\boldsymbol{\sigma}^{\bar{d}}\|_a = 3 \left(\frac{|\sigma_{12}|^a + |\sigma_{21}|^a + |\sigma_{13}|^a + |\sigma_{31}|^a + |\sigma_{23}|^a + |\sigma_{32}|^a}{6} \right)^{1/a} \quad (3)$$

Dans les deux critères, les paramètres R_∞ et \bar{R}_∞ sont les valeurs à saturation de l'écroutissage isotrope, σ_y et $\bar{\sigma}_y$ des limites d'élasticité (selon $\langle 001 \rangle$ et $\langle 111 \rangle$).

Le couplage avec les évolutions microstructurales est introduit à travers la contrainte d'Orowan (Eq. (4)).

$$\sigma_{\text{ORO}} = \frac{\kappa_{\text{ORO}} G}{\|\boldsymbol{\omega}\|} \quad (4)$$

avec G le module de cisaillement et K_{ORO} un paramètre. Cette contrainte, dépendant inversement de la largeur d'un seul couloir de matrice dans les modèles 1D, est ici dépendante de la norme du tenseur adimensionnel $\boldsymbol{\omega}$ ayant pour composantes les trois largeurs des couloirs de matrice (Fig. 1), normalisées par rapport à leur largeur à la température étudiée après stabilisation thermique (Eq. (2)) ($w_0 = g(f_{\gamma'}) w_{001}^0$, dépendant de la valeur à température ambiante w_{001}^0 et des fractions volumiques des γ' à l'ambiante $f_{\gamma'}^0$ et à la température étudiée $f_{\gamma'}$ [5]).

$$\mathbf{w} = \begin{bmatrix} w_1 & 0 & 0 \\ 0 & w_2 & 0 \\ 0 & 0 & w_3 \approx w_2 \end{bmatrix}_{NAB} \quad \boldsymbol{\omega} = \frac{\mathbf{w}}{g(f_{\gamma'}) w_{001}^0}, \quad g(f_{\gamma'}) = \frac{1 - f_{\gamma'}}{1 - f_{\gamma'}^0} \quad (5)$$

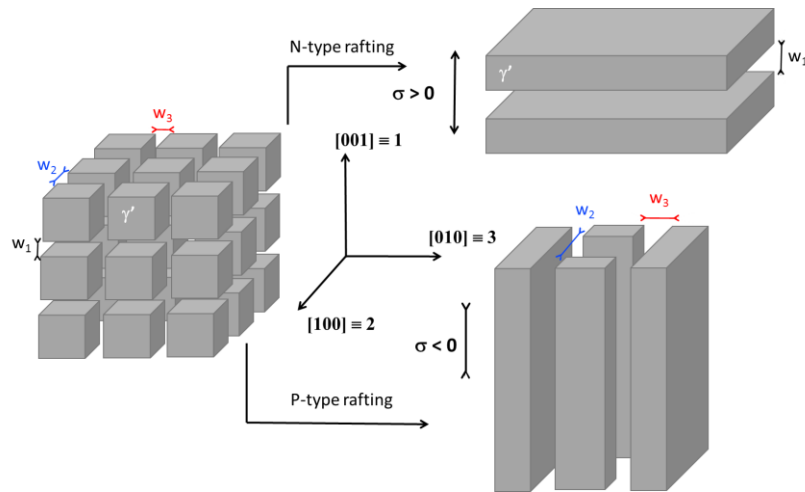


Figure 1. Evolution des largeurs des couloirs de matrice d'un superalliage monocristalline base Nickel en fonction de la direction et du signe du chargement.

Le taux de déformation plastique total est calculé par normalité (Eq. (6)). Les deux taux de déformation plastique cumulée sont définis Eq. (7).

L'écoulement de type Hill suit une loi à saturation à aux hautes vitesses permettent de représenter correctement les chargements rapides (paramètres $K_N, N, \sigma_{v\infty}$). Le deuxième écoulement est formulé par une loi de type Norton (Eq. 8 paramètres \bar{K}_N, \bar{N}).

$$\dot{\epsilon}^p = \dot{p}_1^{\text{Hill}} \frac{\partial f_1}{\partial \boldsymbol{\sigma}} + \dot{p}_2^{\bar{d}} \frac{\partial f_2}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \quad (6)$$

$$\dot{p}_1^{\text{Hill}} = \sqrt{\frac{2}{3} \left(\dot{\epsilon}_1^{pd} : \dot{\epsilon}_1^{pd} + \frac{1}{h^2} \dot{\epsilon}_1^{pd} : \dot{\epsilon}_1^{pd} \right)} \quad \dot{p}_2^{\bar{d}} = \sqrt{\frac{2}{3} \dot{\epsilon}_2^{pd} : \dot{\epsilon}_2^{pd}} \quad (7)$$

$$\dot{p}_1^{\text{Hill}} = \left\langle -\frac{\sigma_{v\infty}}{K_N} \ln \left(1 - \frac{f_1}{\sigma_{v\infty}} \right) \right\rangle_+^N \quad \dot{p}_2^{\bar{d}} = \left\langle \frac{f_2}{\bar{K}_N} \right\rangle_+^{\bar{N}} \quad (8)$$

Dans l'Eq. (7) $\dot{\epsilon}_1^{pd}$, $\dot{\epsilon}_1^{\bar{pd}}$ sont définis à partir de $\dot{\epsilon}_1^p = \dot{p}_1^{\text{Hill}} \frac{\partial f_1}{\partial \sigma}$ par $\dot{\epsilon}_1^{pd} = \mathbb{P}^d : \dot{\epsilon}_1^p$ et $\dot{\epsilon}_1^{\bar{pd}} = \mathbb{P}^{\bar{d}} : \dot{\epsilon}_1^p$. De même, $\dot{\epsilon}_2^{pd} = \dot{p}_2^{\bar{d}} \frac{\partial f_2}{\partial \sigma}$. Les taux \dot{p}_1^{Hill} et $\dot{p}_2^{\bar{d}}$ jouent le rôle de multiplicateurs (visco-) plastiques.

On retient le critère de Hill pour f_1 car la dépendance du mode « déviateur non diagonal » $\sigma^{\bar{d}}$ permet de représenter l'anisotropie de la réponse mécanique sous chargement désorienté et de retrouver une double viscosité selon $\langle 111 \rangle$ (Eq. (9)), en accord avec le résultat de l'activation (en plasticité cristalline) des systèmes octaédriques ayant un facteur de Schmid faible mais non nul [6]. Cependant, puisque pour un chargement selon $\langle 001 \rangle$ la décomposition en modes de Kelvin redonne un mode « déviateur non diagonal » nul, on retrouve ainsi une seule viscosité, celle représentative des glissements octaédriques (Eq. (10)). Notant $\dot{\epsilon}^p$ le taux de déformation plastique uniaxiale (dans le cas considéré, soit $\langle 001 \rangle$ soit $\langle 111 \rangle$)

$$\langle 111 \rangle \quad |\dot{\epsilon}^p| \approx \left\langle \frac{|\sigma| - \bar{R}_\infty - \varpi \frac{\kappa_{\text{OROG}}}{\|\dot{\omega}\|} - \bar{\sigma}_y}{\bar{K}_N} \right\rangle_+^{\bar{N}} + h \left\langle \frac{h|\sigma| - R_\infty - \frac{\kappa_{\text{OROG}}}{\|\dot{\omega}\|} - \sigma_y}{K_N} \right\rangle_+^N \quad (9)$$

$$\langle 001 \rangle \quad |\dot{\epsilon}^p| \approx \left\langle -\frac{\sigma_{v\infty}}{K_N} \ln \left(\frac{|\sigma| - R_\infty - \frac{\kappa_{\text{OROG}}}{\|\dot{\omega}\|} - \sigma_y}{K_N} \right) \right\rangle_+^N \quad (10)$$

La valeur du paramètre de Hill h peut être identifiée grâce aux lois de conversion macro-micro [7]. Remarquons que pour les températures auxquelles la réponse de l'alliage a tendance à devenir isotrope (observation expérimentale à $T > 1100^\circ\text{C}$ [8]) la valeur $h = 1$ permet de retrouver une réponse viscoplastique isotrope par le modèle. Les lois d'évolution de la microstructure de type croissance isotrope et coalescence isotrope ou directionnelle sont alors formulées en terme de loi d'évolution $\dot{\omega} = \dots$. Reprenant l'équation gouvernant l'évolution des couloirs de matrice proposée par [9], il est possible de démontrer qu'à l'échelle du VER et dans la Base naturelle d'Anisotropie cette évolution est proportionnelle à la normale à la surface de plasticité \mathbf{n} projetée sur le mode « déviateur diagonal » de Kelvin $\mathbf{n}^d = \mathbb{P}^d : \mathbf{n}$ (Eq. (11)).

$$\mathbf{w}' \propto \dot{\omega}' \propto \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2} \end{bmatrix}_{NAB} \propto \mathbf{n}^d \quad (11)$$

En étendant l'écriture proposée en [5] au cas multiaxial on peut alors formuler une loi d'évolution des couloirs comprenant la totalité des phénomènes de dégradation microstructurale (Eq. (12)), écriture naturellement adaptée aux lois viscoplastiques proposées et aussi permettant de reproduire les évolutions de type mise en radeaux de la phase γ ($\dot{\omega}^{\text{raft}} = \dots$) ainsi que coalescence isotrope sous charge ($\dot{\omega}_{\text{mc}} = \dots$) et sans charge ($\dot{\omega}_{\text{LSW}} = \dots$) de la phase γ . Dans l'exponentielle d'Arrhenius de $\dot{\omega}^{\text{raft}}$ la fonction $\min(\sigma_{eq}^d, \sigma_{lim}^\mu)$, avec σ_{lim}^μ un paramètre « matériau », est introduite pour limiter les évolutions sous chargement rapide (e traction notamment). Un seuil de plasticité est introduit dans $\dot{\omega}^{\text{raft}}$ et $\dot{\omega}_{\text{mc}}$ pour que sur matériau pré-déformé les dégradations puissent se développer aussi sans charge [10]. La fonction d'Heaviside \mathcal{H} sert à obtenir une dissipation positive quel que soit le chargement, y compris non- proportionnel [4].

$$\dot{\omega} = \dot{\omega}^{\text{raft}} + \dot{\omega}_{\text{mc}} \mathbf{1} + \sqrt{3} \dot{\omega}_{\text{LSW}} \frac{\omega}{\|\omega\|}$$

$$\begin{cases} \dot{\omega}^{\text{raft}} = K_{\text{raft}} \exp\left(-\frac{Q - \min(\sigma_{eq}^d, \sigma_{lim}^\mu) U_{\text{raft}}}{k_B T}\right) \mathcal{H}(p_1^{\text{Hill}} - \varepsilon_{\text{th}}^p) \mathcal{H} \mathbf{n}^d & \text{mise en radeaux} \\ \dot{\omega}_{\text{mc}} = K_{\text{mc}} \exp\left(-\frac{Q - \sigma_{eq} U_{\text{mc}}}{k_B T}\right) \mathcal{H}(p_2^d - \bar{\varepsilon}_{\text{th}}^p) & \text{coalescence isotrope} \\ \dot{\omega}_{\text{LSW}} = \frac{K_{\text{LSW}}}{3\omega_{\text{LSW}}^2} \exp\left(-\frac{Q}{k_B T}\right) & \text{croissance isotrope} \end{cases} \quad (12)$$

K_{raft} , U_{raft} , Q , $\varepsilon_{\text{th}}^p$, K_{mc} , U_{mc} , $\bar{\varepsilon}_{\text{th}}^p$, K_{LSW} sont des paramètres caractéristiques du matériau et k_B est la constante de Boltzmann (valeurs donnés en [4]).

Les équations complémentaires du modèle (lois d'état: élasticité, ...) sont obtenues à partir de l'écriture du potentiel d'état [4].

Le fluage tertiaire est modélisé via une loi d'endommagement en vitesse (en taux) de type Lemaitre formulée en $\dot{D} = \dots$ prenant en compte l'effet de la triaxialité des contraintes et couplée à la viscoplasticité via la contrainte effective (Eq. 13),

$$\tilde{\sigma} = \frac{\sigma}{1-D} \quad (13)$$

3 Prédiction de la réponse mécanique du CMSX-4 à 1050°C

Ce modèle de viscoplasticité couplée aux évolutions microstructurales permet de reproduire l'accélération de fluage observée (absence d'une phase de fluage à vitesse stable) à 1050°C [4]. Remarquons aussi qu'à 1050°C l'alliage exhibe un fluage primaire négligeable, d'où le choix de ne pas introduire d'écrouissage isotrope. Grâce à la norme non quadratique introduit dans la fonction critère f_2 (Eq. (1) et (3)) un champ de déformation pas homogène a été retrouvé sur un tube sous chargement de torsion lorsque $a < 2$ (Fig. 2).

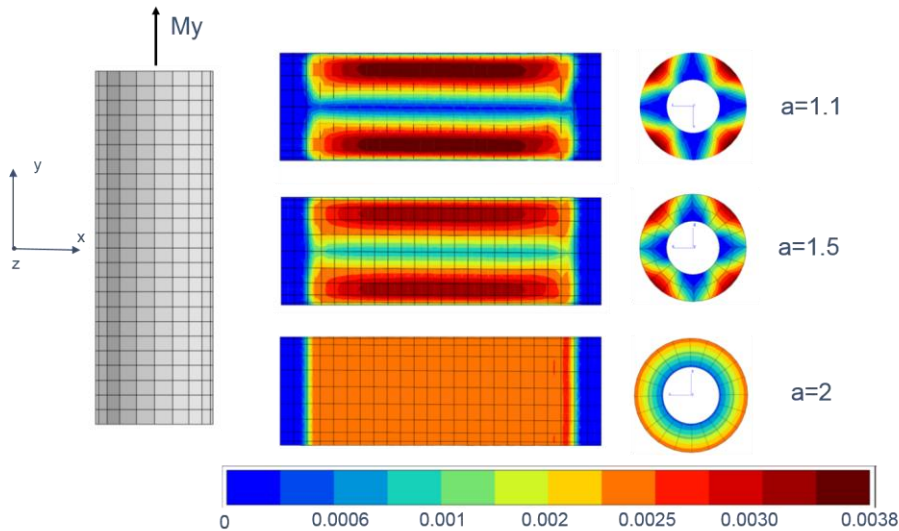


Figure 2. Carte de déformation plastique cumulée sous chargement de torsion,
 $p = \int \sqrt{\frac{2}{3} \dot{\epsilon}^p : \dot{\epsilon}^p} dt$.

Enfin, grâce à la fonction $\min(\sigma_{eq}^d, \sigma_{lim}^\mu)$ présente dans l'évolution de la contribution ω^{raft} (Eq. (12)) les évolutions microstructurales restent limitées sous chargement rapide (Fig. 3).

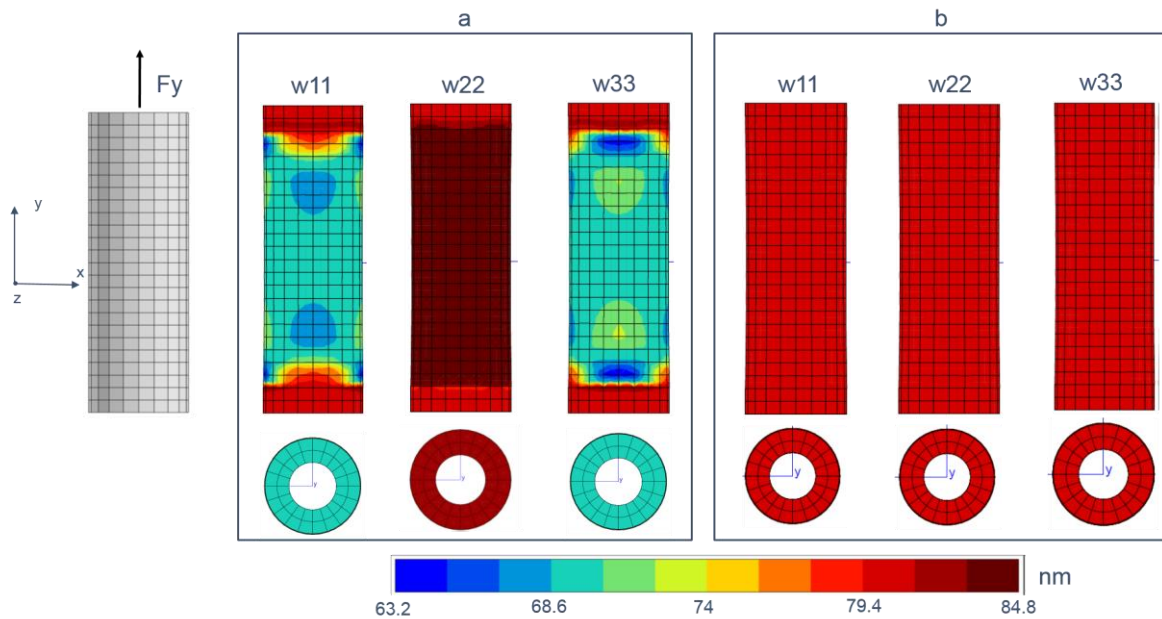


Figure 3. Évolution de la largeur des couloirs de matrice w_{11} , w_{22} , w_{33} sous chargement de traction monotone avec une vitesse de déplacement (a) de 10^{-5} s^{-1} et (b) 10^{-3} s^{-1} .

4 Conclusions

Grace à la modélisation tensorielle proposée, l'adoucissement généré par les évolutions de la microstructure γ - γ' est reproduit. La loi d'évolution des couloirs de matrice est naturellement adaptée aux lois viscoplastiques proposées. Elle est également capable de reproduire des évolutions microstructurales différentes selon l'orientation cristalline: mise en radeaux et croissance isotrope de la phase γ' selon $\langle 001 \rangle$, coalescence isotrope et croissance isotrope de la phase γ' selon $\langle 111 \rangle$, les trois types d'évolutions selon des orientations cristallines autres que $\langle 001 \rangle$ et $\langle 111 \rangle$. Enfin, plus classiquement, introduire un endommagement phénoménologique permet de modéliser le fluage tertiaire et d'obtenir une estimation assez précise de la durée de vie et les allongements à rupture.

Remerciements

Les auteurs remercient Safran Helicopter Engines pour avoir financé ce travail.

Références

- [1] M. François, Identification des symétries matérielles des matériaux anisotropes, Ph.D. Thesis, Université Paris VI, Cachan (France).
- [2] A. Bertram, J. Olschewski, Anisotropic creep modeling of the single crystal superalloy SRR99, *Comp. Mater. Sci.* 5 (1996) 12-16.
- [3] R. Asaro, Cristal Plasticity, *J. App. Mech.-T. ASME* 50 (1983) 921-934.
- [4] Desmorat R., Mattiello A., Cormier J., A tensorial thermodynamic framework to account for the γ' rafting in nickel-based single crystal superalloys, *Int. J. Plasticity* (2017), in press <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2017.03.010>.
- [5] J.B. le Graverend, J. Cormier, F. Gallerneau, P. Villechaise, S. Kruch, J. Mendez, A microstructure-sensitive constitutive modeling of the inelastic behavior of single crystal nickel-based superalloys at very high temperature, *Int. J. Plast* 59 (2009) 55-83.

- [6] Ghosh, R. N., Curtis, R.V., and McLean, M., Creep deformation of single crystal superalloys- modelling the crystallographic anisotropy, *Acta Metall. Mater.* 38(10) (1990), 1977-1992.
- [7] A. de Bussac, P. Poubanne, Loi de comportement anisotrope de l'AM1 de 20°C à 1200°C, YKOM1/YLEV 60291, (1992).
- [8] P. Caron, Y. Otha, Y.G. Nakagawa, T. Khan, Creep deformation anisotropy in single crystal superalloys, *Superalloys 1988*, TMS, Seven Springs, Champion, PA, USA, 215-224.
- [9] T. Tinga, W.A.M. Brekelmans, M.G.D. Geers, Directional coarsening in nickel-base superalloys and its effect on the mechanical properties, *Comp. Mater. Sci.*, 47 (2009) 471-481.
- [10] N. Matan, D. Cox, C.M.F. Rae, R.C. Reed, On the kinetics of rafting in CMSX-4 superalloys single crystals, *Acta Mater.* 47 (1999), 2031-2045.