

Stage de Master : Développement d'une approche en champ complet pour l'évolution de précipités dans les alliages métalliques

Pierre-Antoine Geslin, Michel Perez
 pierre-antoine.geslin@insa-lyon.fr, michel.perez@insa-lyon.fr
 Bld. St Exupery, 23 Avenue Jean Capelle

Durée : 6 mois (Mars - Août 2020)

Indemnité : 500 euros/mois

Au cours de leur élaboration, la plupart des alliages métalliques subissent des traitements thermiques qui affecte leur microstructure. Idéalement, la microstructure finale est celle qui permet d'optimiser les propriétés mécaniques de l'alliage avec le meilleur compromis résistance/ductilité. En particulier, une stratégie largement utilisée consiste à faire précipiter une seconde phase au sein du matériaux qui constitue alors une barrière au mouvement des dislocations et accroît ainsi la résistance du matériaux (par ex. Inconel 718, alliages d'aluminium 2xxx, 6xxx et 7xxx). Suite à leur nucléation, la distribution de taille de précipités évolue par mûrissement d'Ostwald (voir Fig. 1) : les gros précipités croissent au détriment des plus petits du fait de l'influence de la courbure de l'interface sur les compositions d'équilibre (effet Gibbs-Thomson) et de la diffusion de solutés dans la matrice. Alors que ce mécanisme de mûrissement contrôle la taille finale des précipités et donc les propriétés mécaniques des alliages, la prédiction de la microstructure finale repose encore sur des modèles simples tels que la théorie Lifshitz-Slyozov-Wagner (LSW) qui est dérivée grâce à des hypothèse fortes. A cause de ces approximations, cette théorie ne permet pas de prédire les corrélations spatiales entre les précipités et échoue à intégrer l'influence d'un fort gradient de concentration ou de température rencontré lors de traitements thermiques hétérogènes (soudage, fabrication additive).

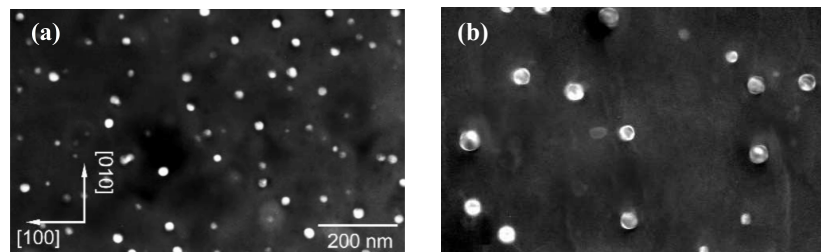


FIGURE 1 – Mûrissement d'Ostwald de précipités Al_3Sc dans un alliage Al-Sc [Watanabe et al., Metal. Mater. Trans. 35A, 2004].

Pour dépasser ces limitations, nous proposons de développer un modèle reposant sur un minimum d'hypothèses et qui consiste à résoudre l'équation de la diffusion en 3D pour suivre l'évolution d'une microstructure statistiquement représentative. La résolution de l'équation de la diffusion sur de tels systèmes est aujourd'hui possible en utilisant la puissance de calcul de GPU (cartes graphiques), dont l'architecture est spécialement adaptée à la résolution numérique des problèmes de diffusion. L'évolution temporelle d'une distribution de précipités sera comparée au résultat théorique données par la théorie LSW. On s'intéressera d'abord au cas d'un alliage modèle AB avant de considérer des alliages réels tels que Al-Sc et l'Inconel 718 afin de comparer les résultats du modèle numérique aux observations expérimentales. Dans un deuxième temps, l'influence de gradients de composition et de température sera également implémentée et étudiée. Le travail de l'étudiant-e consistera à développer le code de diffusion 3D en CUDA (interface de programmation pour les GPU). Il/elle utilisera ensuite ce programme pour étudier le développement de microstructures avant d'analyser les résultats.

Master internship : development of a full-field approach for precipitate evolution in metallic alloys

Pierre-Antoine Geslin, Michel Perez
 pierre-antoine.geslin@insa-lyon.fr, michel.perez@insa-lyon.fr
 Bld. St Exupery, 23 Avenue Jean Capelle

Duration : 6 months (March - August 2020)

Compensation : 500 euros/months

During their elaboration, most metallic alloys are subjected to thermal treatments to finely tune their microstructure. Ideally, the final microstructure is the one optimizing the mechanical properties of the alloy with the best trade-off between toughness and ductility. In particular, a widely used strategy consists in the precipitation of a finely dispersed second phase that acts as a barrier to dislocations movement, increasing the yield stress of the metallic alloy (e.g. Inconel 718, aluminum 2xxx, 6xxx and 7xxx series,...). After their nucleation, the size distribution of the precipitates evolves by Ostwald ripening (see Fig. 1) : large precipitates grow at the expense of small ones due to the influence of the local interface curvature on equilibrium compositions (Gibbs-Thomson effect) and long-range solute diffusion. While this coarsening process controls the final size distribution of the precipitates, and therefore the mechanical properties of the alloys, its prediction still relies on theoretical approaches such as the Lifshitz-Slyozov-Wagner (LSW) theory, that is derived using strong assumptions. Because of these approximations, this theory does not give any information about the spatial correlations between the different precipitates, and fails to predict the precipitate evolution in steep thermal and concentration gradients as encountered during heterogeneous thermal treatment (welding, additive manufacturing).

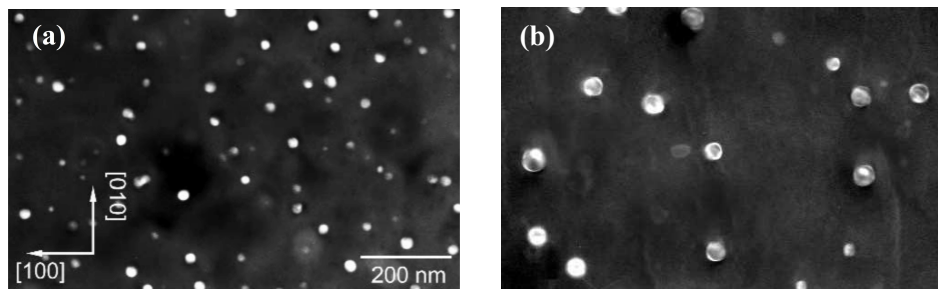


FIGURE 1 – Ostwald Ripening of Al_3Sc precipitates in Al-Sc [Watanabe et al., Metal. Mater. Trans. 35A, 2004].

To overcome these limitation, we propose to consider a minimal set of assumptions by solving the time-dependent Fick diffusion equation in 3D in order to follow the time evolution of a 3D microstructure over statistically significant volumes. Solving the Fick equation on such large systems is now computationally accessible by harnessing the power of new generation GPU (graphical processing units), whose architecture is specially adapted to this kind of diffusion problem. The time evolution of a precipitate distribution will be compared to theoretical results from LSW. We will first focus on a ideal AB alloy before considering real systems such as Al-Sc and Inconel 718 alloys in order to compare our results with experimental observations. In a second step, the influence of composition and thermal gradients will be taken into account and investigated. The student's work will first consists in developing a 3D diffusion code in CUDA (programming interface for GPU). He/she will then use this software to perform large scale simulations before analyzing the results.