



**HAL**  
open science

# Modélisation de la fragilisation due au gonflement dans les aciers inoxydables austénitiques irradiés

Xu Han

► **To cite this version:**

Xu Han. Modélisation de la fragilisation due au gonflement dans les aciers inoxydables austénitiques irradiés. Autre. Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2012. Français. NNT : 2012ENMP0066 . pastel-00818326

**HAL Id: pastel-00818326**

**<https://pastel.hal.science/pastel-00818326>**

Submitted on 26 Apr 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.

École doctorale n°432 : Science et Métiers de l'Ingénieur

## Doctorat ParisTech

# THÈSE

pour obtenir le grade de docteur délivré par

**l'École nationale supérieure des mines de Paris**

**Spécialité "Science et Génie des Matériaux"**

*présentée et soutenue publiquement par*

**Xu HAN**

le 14 décembre 2012

## **Modélisation de la fragilisation due au gonflement dans les aciers inoxydables austénitiques irradiés**

Directeurs de thèse : **Jacques BESSON et Benoît TANGUY**  
Co-encadrement de la thèse : **Samuel FOREST et Nicolas RUPIN**

### Jury

**M. Djimédo KONDO**, Professeur, IJLRDA, UPMC  
**M. Thomas PARDOEN**, Professeur, IMAP, UCL  
**M. Marc FIVEL**, Directeur de recherche CNRS, SIMaP-GPM2, INP-G  
**M. Gilles PERRIN**, Ingénieur Expert, Direction R&D, Areva NP  
**M. Ludovic VINCENT**, Ingénieur-Chercheur, Expert, CEA Saclay  
**M. Jean-Paul MASSOUD**, Ingénieur de recherche, MMC, EDF R&D  
**M. Samuel FOREST**, Directeur de recherche CNRS, CdM, Mines ParisTech  
**M. Nicolas RUPIN**, Ingénieur de recherche, MMC, EDF R&D  
**M. Jacques BESSON**, Directeur de recherche CNRS, CdM, Mines ParisTech  
**M. Benoît TANGUY**, Ingénieur-Chercheur, HDR, Expert Sénior, CEA Saclay

Président  
Rapporteur  
Rapporteur  
Examineur  
Examineur  
Examineur  
Invité  
Invité  
Directeur de thèse  
Co-directeur de thèse

T  
H  
È  
S  
E



*Apprendre sans réfléchir est vain.  
Réfléchir sans apprendre est dangereux.*

---

*Confucius*



# Remerciements

Cette étude a été réalisée, dans le cadre d'une thèse de doctorat, au Centre des Matériaux(CdM) de l'École des Mines de Paris, et au Laboratoire du Comportement Mécanique des Matériaux Irradiés (LCMI) au sein du Commissariat à l'Énergie Atomique et aux Énergies Alternatives (CEA) de Saclay. Le travail est en collaboration avec le département Matériaux et Mécanique des Composants (MMC) d'EDF R&D.

Avant tout, je tiens à remercier sincèrement l'ensemble des membres du jury – le président, les rapporteurs, les examinateurs et les invités – pour avoir accepté d'examiner ce travail, et qui m'ont fait l'honneur d'assister à ma soutenance de thèse.

Je souhaiterais tout d'abord exprimer mon plus profond respect et mes plus vifs remerciements à Messieurs Benoît Tanguy, Jacques Besson et Samuel Forest, pour l'encadrement, l'encouragement et le soutien qu'ils m'ont apporté durant ces trois ans de thèse. Leur mode de pensée, et surtout la façon organisée de résoudre un problème scientifique, m'ont beaucoup aidé tout au long de la thèse, et que je conserverai dans le futur. Je voudrais adresser également un grand merci pour leurs compétences excellentes et expériences professionnelles. Tous les progrès que j'ai fait pendant ces trois ans, c'est sans doute grâce à eux.

Je suis très reconnaissant à David Leboulch et Arnaud Courcelle de m'avoir donné le soutien technique sur l'utilisation du code de calcul Cast3M. Merci pour leur grande disponibilité et leurs précieux conseils. Je tiens à remercier Ludovic Vincent et Christian Robertson, pour les échanges très agréables et importants qui m'ont permis de construire et améliorer le modèle cristallin dans Cast3M. J'adresse également mes remerciements à mes deux stagiaires encadrés au cours de ma thèse, Xiangjun Shi et Wen Zhang, pour leurs contributions à l'implémentation numérique de la loi cristalline dans le code de calcul.

Je tiens à exprimer ma reconnaissance aux chercheurs d'EDF, Sylvain Leclercq, Nicolas Rupin et Cédric Pokor, de m'avoir apporté des suggestions et des remarques pertinentes qui m'ont été très précieuses sur l'avancement de cette étude. Je les remercie également pour le cofinancement de ma thèse.

Je remercie l'équipe VAL et l'équipe informatique du Centre des Matériaux, pour le support technique sur l'utilisation du code de calcul ZéBuLoN et du cluster de calcul numérique. Merci pour leur gentillesse et leurs compétences techniques impressionnantes.

Un grand merci à tous mes amis thésards et post-doctorants du CdM et du LCMI, de m'avoir aidé tout au long de ma thèse, ainsi que de m'avoir rendu une ambiance très agréable et amicale à travailler.

Enfin, je tiens à exprimer mes profonds remerciements à mes parents à Pékin de m'avoir soutenu pendant ces trois ans, et à ma femme pour ses encouragements et aides pour la période la plus difficile de ce travail.

Ce travail est dédié à la mémoire de mes grands-parents qui ont été décédés pendant les années de mes études en France. 谨以此论文纪念并献给我于法国留学期间过世的亲人。

Ivry-sur-Seine, 18 décembre 2012



# Table des matières

<b>Introduction</b> .....	<b>1</b>
<b>Chapitre 1 : Recherche bibliographique</b> .....	<b>7</b>
1.1 Aciers inoxydables austénitiques à l'état non-irradié.....	7
1.2 Effets d'irradiation .....	9
1.2.1 Quelques notions : irradiation neutronique, réacteurs nucléaires.....	9
1.2.2 Evolution des propriétés mécaniques due à l'irradiation .....	11
1.2.3 Evolution microstructurale lors de l'irradiation .....	16
1.2.3.1 Evolution du réseau initial de dislocations.....	17
1.2.3.2 Formation d'une nouvelle microstructure de dislocations .....	18
1.2.3.3 Formation de bulles de gaz et de cavités .....	24
1.2.3.4 Ségrégation induite par irradiation .....	30
1.2.3.5 Précipitation sous irradiation .....	31
1.2.3.6 Formation de bandes claires .....	32
1.2.4 Bilan – effet d'irradiation sur les aciers inoxydables austénitiques.....	35
1.3 Mécanismes de déformation dans les aciers inoxydables austénitiques fortement irradiés .....	36
1.3.1 Modèle de durcissement par barrières dispersées et d'adoucissement par canalisation....	36
1.3.2 Modèle par blocage des sources induites par les cascades .....	37
1.4 Modèles monocristallins pour une structure CFC .....	39
1.4.1 A propos de l'échelle monocristalline .....	39
1.4.2 Quelques notions élémentaires .....	39
1.4.3 Modèle de comportement du monocristal CFC.....	42
1.4.3.1 Loi d'écoulement viscoplastique .....	42
1.4.3.2 Loi d'écrouissage pour les matériaux à l'état non-irradié.....	43
1.4.3.3 Loi d'écrouissage en prenant compte de l'effet d'irradiation.....	46
1.4.4 Interactions entre dislocations.....	47
1.4.5 Bilan – modèle monocristallin pour les aciers inoxydables austénitiques.....	50
<b>Chapitre 2 : Modèle micromécanique à l'échelle cristalline</b> .....	<b>51</b>
2.1 Formalisme en grandes transformations.....	51
2.2 Loi de comportement du monocristal retenu .....	54
2.2.1 Pour les matériaux à l'état non-irradié .....	54
2.2.2 Pour les matériaux à l'état irradié.....	55
2.3 Implémentation numérique des lois cristallines dans le code de calcul ZéBuLoN .....	57
2.3.1 Méthode d'intégration explicite de Runge-Kutta .....	59
2.3.2 Méthode d'intégration implicite de Newton .....	60
2.3.3 Algorithmes pour les méthodes d'intégration explicite et implicite.....	61
2.3.4 Résolution globale .....	64
2.4 Implémentation numérique des lois cristallines dans le code de calcul Cast3M .....	65
2.5 Tests pour valider les implémentations numériques .....	67
2.5.1 Elasticité cristalline.....	67
2.5.1.1 Calcul analytique des constantes d'élasticité.....	68
2.5.1.2 Validation par la simulation numérique par éléments finis .....	69
2.5.2 Tests simples pour les matériaux non-irradié et irradié sous ZéBuLoN.....	71
2.5.2.1 Vérification de la loi de Schmid via les tests de traction simple .....	72
2.5.2.2 Glissement simple sans écrouissage .....	73
2.5.2.3 Comparaison des résultats obtenus par les deux méthodes d'intégration .....	74



2.5.2.4	Analyse des paramètres du modèle .....	77
2.5.2.5	Calculs réalisés avec les angles d'Euler .....	79
2.5.3	Comparaison des résultats obtenus par ZéBuLoN et par Cast3M .....	79
2.6	Bilan et conclusions partielles.....	81
<b>Chapitre 3 : Identification des paramètres des lois cristallines .....</b>		<b>83</b>
3.1	Données expérimentales liées à la microstructure .....	84
3.2	Mise en œuvre des simulations par éléments finis .....	85
3.2.1	Orientations cristallographiques aléatoires définies par les angles d'Euler .....	86
3.2.2	Stratégies pour l'identification des paramètres.....	86
3.2.2.1	Identification des paramètres pour l'état non-irradié .....	88
3.2.2.2	Identification des paramètres pour l'état irradié – Stratégie 1 .....	90
3.2.2.3	Identification des paramètres pour l'état irradié – Stratégie 2 .....	92
3.2.2.4	Identification des paramètres pour l'état irradié – Stratégie 3 .....	95
3.2.2.5	Identification des paramètres pour l'état irradié – Stratégie 3bis.....	99
3.3	Applications du modèle cristallin aux calculs de poutres polycristallines.....	101
3.3.1	Calcul de poutre polycristalline pour l'état non-irradié .....	101
3.3.2	Comparaison des calculs de structure pour l'état irradié .....	102
3.4	Bilan et conclusions partielles.....	105
<b>Chapitre 4 : Développement d'un modèle monocristallin poreux.....</b>		<b>107</b>
4.1	Introduction aux modèles d'endommagement ductile .....	107
4.2	Proposition d'un critère de plasticité pour un monocristal poreux .....	109
4.3	Implémentation numérique du modèle monocristallin poreux dans le code ZéBuLoN.....	150
4.4	Tests simples sur des monocristaux non-irradié et irradié.....	152
4.5	Bilan et conclusions partielles.....	153
<b>Conclusions et perspectives .....</b>		<b>155</b>
<b>Bibliographie.....</b>		<b>159</b>
<b>Annexe I : Implémentation numérique du modèle cristallin.....</b>		<b>172</b>
<b>Annexe II : Implémentation numérique du modèle monocristallin poreux .....</b>		<b>192</b>

# Introduction

## Contexte industriel et problématique

Un Réacteur à Eau Pressurisée (REP) (**Figure 1.1**) appartient à une filière des réacteurs nucléaires à eau légère dite de "deuxième génération". En France, 58 REP de puissance sont en fonctionnement, représentant environ 76% de la production d'électricité (données : RTE 2009).

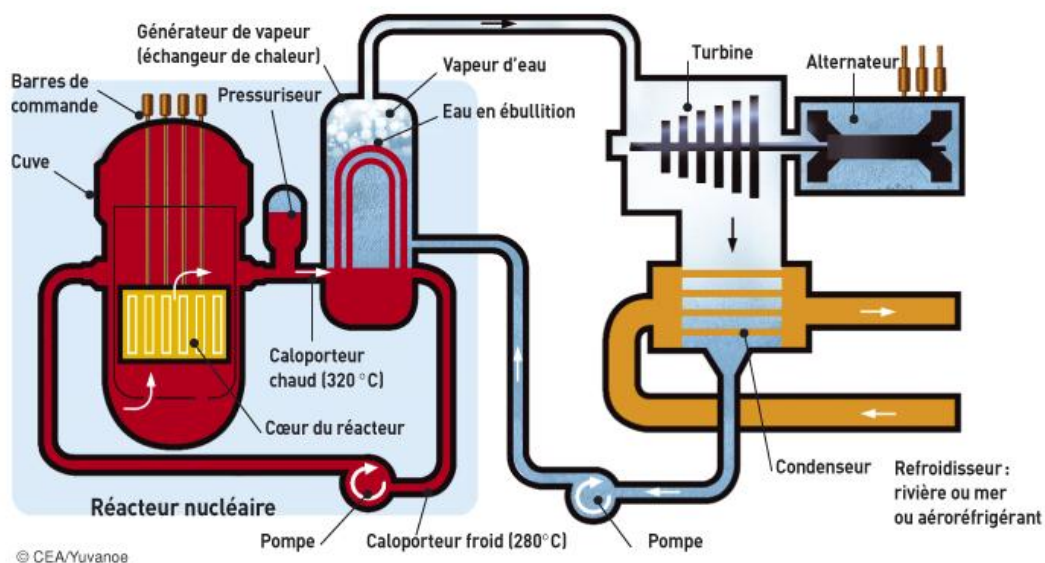


Figure 1.1 : Schéma de principe d'une tranche nucléaire de type REP (source : CEA).

Les internes de cuve dans les REP, sont composés de deux sous-ensembles : les internes inférieurs et les internes supérieurs. Les structures des internes inférieurs de cuve, appelées couramment « internes de cuve », ont pour fonction de supporter latéralement les assemblages combustibles, de maintenir l'alignement entre assemblages et barres de contrôle, de canaliser le fluide caloporteur primaire, et de protéger la cuve contre les rayonnements ionisant émis par le cœur. Ces structures, avec une dimension totale de 3 mètres de diamètre et de 4 mètres de hauteur, sont constituées de cloisons de forme polygonale, de 8 tranches de renforts, de l'enveloppe de cœur cylindrique et des vis (900 à 1000 par tranche) (**Figure 1.2**). Ces composants sont assemblés par des vis. Du fait de leur positionnement proche du cœur du réacteur, elles sont soumises à des forts niveaux d'irradiation neutronique au cours du fonctionnement du réacteur, avec une température qui peut varier entre 280°C et 380°C. En considérant une durée de fonctionnement nominale des REP de 40 ans, selon la distance d'un composant de structure par rapport au cœur du réacteur, la dose d'irradiation peut atteindre jusqu'à 100 dpa (déplacement par atome), soit un taux de dose de  $10^{-7}$ – $10^{-8}$  dpa/s. Selon les données EDF, les conditions d'irradiation maximales et les températures des composants positionnés à la deuxième tranche de renforts (R2) sont présentées dans le **Tableau 1.1**.

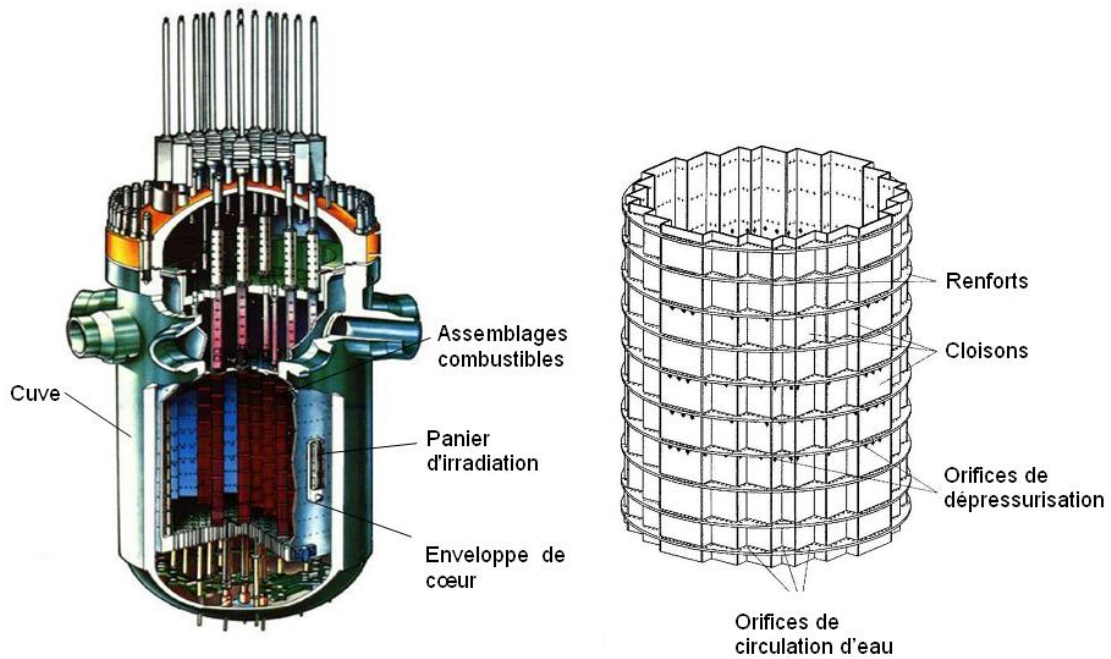


Figure 1.2 : Cœur du réacteur et composants de structures internes inférieures de cuve dans un REP.

Composant	Température (°C)	Dose max. (dpa)
Enveloppe de cœur	≈ 300	12
Renfort	300 – 370	70
Vis	300 – 370	73
Cloisons	300 – 340	100

Tableau 1.1 : Doses d'irradiation maximales et températures des composants positionnés à la deuxième tranche de renforts, pour une durée nominale de fonctionnement de 40 ans (données EDF).

Dans l'industrie nucléaire, les aciers inoxydables austénitiques de la série 300 sont largement utilisés comme matériaux de structures des internes de cuve, en raison de leurs bonnes propriétés mécaniques (résistance mécanique, ductilité, ténacité, etc.) et de leur résistance à la corrosion. Dans un environnement d'irradiation sous chargement, ces matériaux présentent une évolution de microstructure qui induit une modification des propriétés mécaniques. Les défauts d'irradiation (réseau de dislocations, boucles de Frank, et éventuellement précipités en seconde phase) induisent un durcissement qui s'accompagne d'une diminution de la ductilité, d'une localisation de la déformation plastique et d'une forte perte de la ténacité du matériau. La ségrégation chimique aux joints de grains participe à la sensibilité à la corrosion sous contrainte assistée par irradiation (IASCC) de ces matériaux. La germination et la croissance de cavités vides et de bulles de gaz (phénomène de gonflement) modifient potentiellement la plasticité et les propriétés mécaniques pour un certain niveau de dose.

La dégradation des matériaux inoxydables austénitiques due aux conditions d'irradiation sévères limite potentiellement leur durée de fonctionnement opérationnelle. Selon le retour d'expérience d'EDF, la première inspection ultrasonore réalisée sur le palier CPO a montré la fissuration de certaines vis de liaison cloisons-renforts au niveau du congé de raccordement entre la tête et le fût. Depuis les années 90, les contrôles périodiques par ultrasons permettant de détecter la présence des vis

fissurées ont été mis en place. D'après une analyse des conditions de fonctionnement, les vis fissurées, par rupture intergranulaire, sont situées dans la zone la plus sollicitée mécaniquement, accompagnée d'une forte fluence d'irradiation et d'une température assez élevée. Lors du remplacement des vis, la géométrie du design des vis a été modifiée, afin de diminuer les contraintes dans le congé de raccordement et de modifier les conditions locales de circulation de l'eau. L'expertise des vis fissurées a été débutée afin d'identifier les mécanismes de l'IASCC, qui est liée à la présence de certain niveau de fluence et de contraintes importantes. Actuellement, à notre connaissance, les vis de liaison sont les seules structures d'Internes de REP qui montrent un mode d'endommagement par fissuration.

Le gonflement induit par irradiation peut être considéré comme un facteur éventuel et un paramètre technique limitant la durée de fonctionnement des réacteurs, d'une part à cause de la modification des propriétés mécaniques et d'autre part du fait des modifications dimensionnelles induites (gradient de gonflement entre différents composants) (**Figure 1.3**) [Dubuisson (2011)]. Compte tenu des forts niveaux de fluence auquel le gonflement macroscopique est associé, ce phénomène a été peu étudié expérimentalement en environnement REP. La plupart des études ont été menées dans les réacteurs à neutrons rapides (RNR) où les conditions de température, de flux et de doses reçues sont réputées plus propices au développement du gonflement. L'étude du gonflement en conditions REP a été entreprise par le programme expérimental international GONDOLÉ pour quantifier la présence de gonflement pour des forts niveaux de fluence pour différentes nuances d'aciers inoxydables austénitiques. Cependant, peu de données de la littérature ouverte sur le gonflement dans les aciers inoxydables austénitiques en environnement REP sont disponibles.

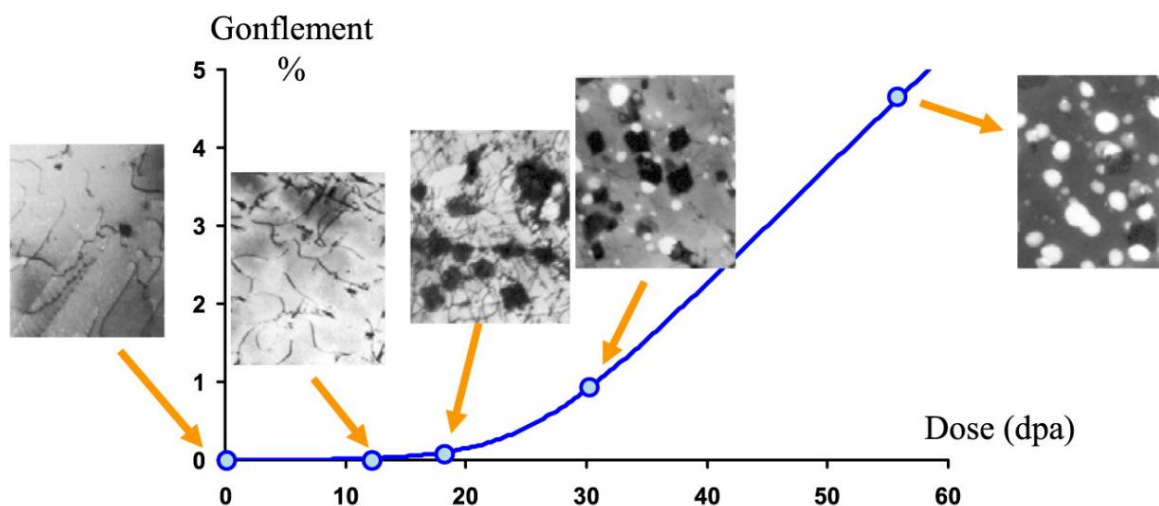


Figure 1.3 : Gonflement en fonction de la dose, pour un acier 316 hypertrempé irradié à 600°C, dans le réacteur à neutrons rapides PHENIX [Dubuisson (2011)].

A ce jour, l'âge moyen des réacteurs en cours de fonctionnement en France est de près de 28 ans. La connaissance fine du comportement des matériaux des structures industrielles est une des composantes de la sûreté et de l'intégrité de ces structures et particulièrement lors de leur fonctionnement au-delà de la durée prévue lors de leur conception. La prolongation de la durée de fonctionnement des centrales nucléaires actuelles et le développement de nouveaux réacteurs rentrent dans cette problématique avec un effort accru de R&D pour mieux comprendre et modéliser les mécanismes d'évolution des propriétés mécaniques et d'endommagement des matériaux soumis à des niveaux de fluence importants.

La compréhension et la modélisation du comportement mécanique des aciers austénitiques inoxydables irradiés sont donc particulièrement importantes dans la mise en œuvre d'une approche prédictive de la durée de fonctionnement des structures d'internes de Cuve. Le projet PERFORM 60 (FP7) [PERFORM60 (2008)] conduit par EDF et d'autres grands acteurs internationaux (CEA, SCK-CEN, CNRS, etc.) a été lancé en 2009 avec pour objectifs de fournir une modélisation multi-échelle de la plasticité et de l'endommagement sous irradiation pour la cuve (acier ferritique) et les internes de cuve. Pour la cuve, ce programme va poursuivre et améliorer les outils existants développés au sein du projet PERFECT (FP6). Les outils numériques similaires pour les internes de cuve sont en cours de développement, ils doivent permettre d'étudier deux des trois principaux mécanismes de dégradation considérés dans ces structures : l'IASCC et le fluage par irradiation.

## Objectif général

L'objectif de cette étude est de contribuer à la compréhension et à la prédiction de l'évolution des propriétés mécaniques post-irradiation en présence de gonflement dans les aciers inoxydables austénitiques – matériaux utilisés dans les internes de cuve des REP, soumis à des forts niveaux d'irradiation neutronique. Une application potentielle des outils développés est l'évaluation de l'intégrité de composants présentant du gonflement lors d'une sollicitation rapide (tremblement de terre, tsunami, ou chute d'un composant lors de sa manutention). Pour ce faire, une modélisation à l'échelle cristalline intégrant explicitement les données microstructurales et leurs évolutions avec l'irradiation (présence de défauts d'irradiation, apparition de la localisation de la déformation) est proposée, afin d'étudier ses conséquences au niveau macroscopique : la modification du comportement mécanique.

## Méthodologie

Dans le cadre de la thèse, la démarche développée est basée sur deux axes principaux. Il s'agit premièrement de fournir les lois de comportement à l'échelle cristalline pour les aciers inoxydables austénitiques à l'état non-irradié et à l'état irradié, en tenant compte des défauts d'irradiation (*e.g.* boucles de dislocations de Frank, cavités, précipités). Ces lois cristallines serviront ensuite à réaliser les simulations numériques sur un agrégat polycristallin contenant un nombre suffisant de grains. Ce dernier, considéré comme un VER (Volume Élémentaire Représentatif), permet de simuler la réponse macroscopique en fonction du niveau d'irradiation. Le deuxième axe est le développement d'un modèle de plasticité et d'endommagement pour monocristal poreux (en présence de cavités). La combinaison de la loi cristalline et du modèle d'endommagement à l'échelle cristalline, permettra d'étudier à l'échelle de l'agrégat polycristallin l'effet du gonflement sur les propriétés mécaniques (*e.g.* plasticité et ténacité).

Dans un premier temps, le comportement mécanique des matériaux non-irradiés et irradiés sera modélisé en utilisant la notion de la plasticité cristalline, dont les équations constitutives sont basées sur les évolutions des densités de dislocations et des densités de défauts d'irradiation. Les lois de comportement seront implémentées dans deux codes de calcul par éléments finis – ZéBuLoN (code éléments finis développé par l'école des Mines de Paris) et Cast3M (code éléments finis développé par le CEA). Les tests et les comparaisons entre les deux codes de calcul seront réalisés à l'échelle du

monocristal et du polycristal. L'identification des paramètres des lois de comportement pour les matériaux non-irradié et irradié à différentes doses d'irradiation sera finalement effectuée.

Dans un deuxième temps, le développement d'un critère de plasticité pour le monocristal poreux basé sur l'approche variationnelle sera entrepris, afin de permettre l'homogénéisation des monocristaux poreux pour réaliser les calculs de polycristaux présentant des cavités. Celui-ci sera implémenté dans le code de calcul ZéBuLoN, afin d'évaluer l'effet du gonflement dû à l'irradiation sur la modification des propriétés mécaniques, en particulier son influence sur la plasticité et la ténacité.



# Chapitre 1 : Recherche bibliographique

## 1.1 Aciers inoxydables austénitiques à l'état non-irradié

Dans les internes de cuve des REP actuels, les aciers inoxydables austénitiques de la série AISI 300 sont employés : 304L hypertrempé (304L Hyp) comme matériaux de structure, pour le cloisonnement et les renforts, ainsi que 316/316L écroui (316/316L E) pour la visserie. L'acier 316L à très bas carbone a été largement utilisé par l'industrie nucléaire française. Il possède une très bonne résistance à la corrosion intergranulaire par rapport à sa nuance de base. Les dénominations, les spécifications chimiques des aciers pour l'industrie nucléaire et les compositions chimiques des matériaux de référence étudiés au sein du CEA [Pokor (2003), Garnier (2007), Renault et al. (2009) et Cissé (2012)] sont données dans les **Tableau 1.1** et **Tableau 1.2**.

N°	Norme AISI	Norme AFNOR	Références indicatives
1	304L	X2 CrNi19-10	Pokor (2003), Garnier (2007), Renault et al. (2009), Renault et al. (2010) et Renault et al. (2011)
2	304L	X2 CrNi 18-8	Cissé (2012)
3	316	X5 CrNiMo 17-11-2	Pokor (2003); Garnier (2007)
4	316L	X2CrNiMo17-12-2	AFNOR NFA 35573/574

Tableau 1.1 : Dénominations des aciers suivant la norme américaine AISI et la norme française AFNOR.

Nuance	C	S	P	Si	Mn	Ni	Cr	N	Mo	Cu	Co	B
304L (spéc.)	<0.035	<0.03	<0.04	<1	<2	[9;10]	[18.5;20]	<0.08	-	<1	<0.2	<15ppm
304L (Réf. 1)	0.022	7ppm	0.032	0.36	1.79	9.86	18.61	0.061	-	0.25	0.064	9ppm
304L (Réf. 2)	-	0.026	0.023	0.42	1.50	8.25	18.3	-	0.32	0.25	0.05	0.001
316 (spéc.)	[0.03;0.08]	<0.03	<0.035	<1	<2	[10;14]	[16;18]	-	[2.25;3]	<1	<0.2	-
316 (Réf. 3)	0.054	0.022	0.027	0.68	1.12	10.60	16.60	0.023	2.25	0.24	0.12	9ppm

Tableau 1.2 : Spécifications chimiques des aciers pour le nucléaire [RCC-M (1988)] et compositions chimiques des matériaux étudiés au sein du CEA (% en masse), avec les références citées dans le **Tableau 1.1**. Dans différentes nuances, le symbole « L » signifie la faible teneur en carbone.

Ces deux nuances de matériaux sont austénitisées à 1050°C pendant 30 minutes puis trempées à l'eau. Le matériau 316 E est utilisé à l'état écroui d'environ 12%. L'acier 304L Hyp possède des grains recristallisés d'un diamètre équivalent d'environ 40µm, contient peu de dislocations (densité initiale de l'ordre de grandeur de  $10^{10}m^{-2}$ ) et une très faible quantité de ferrite ( $\approx 1.3\%$ ). L'acier 316 E est presque purement austénitique et est utilisé à l'état écroui d'environ 12% résultant d'un écrouissage à froid lors de l'étirage des barres mères. Il contient moins de 0.07% de ferrite, une taille de grains



d'environ  $40\mu\text{m}$ , mais avec la présence de grains maclés et d'un réseau initial de dislocations très important (de l'ordre de grandeur de  $10^{14}\text{m}^{-2}$ ), sous forme de cellules de dislocations. Les microstructures pour ces deux matériaux à température ambiante sont montrées sur la **Figure 1.1**.

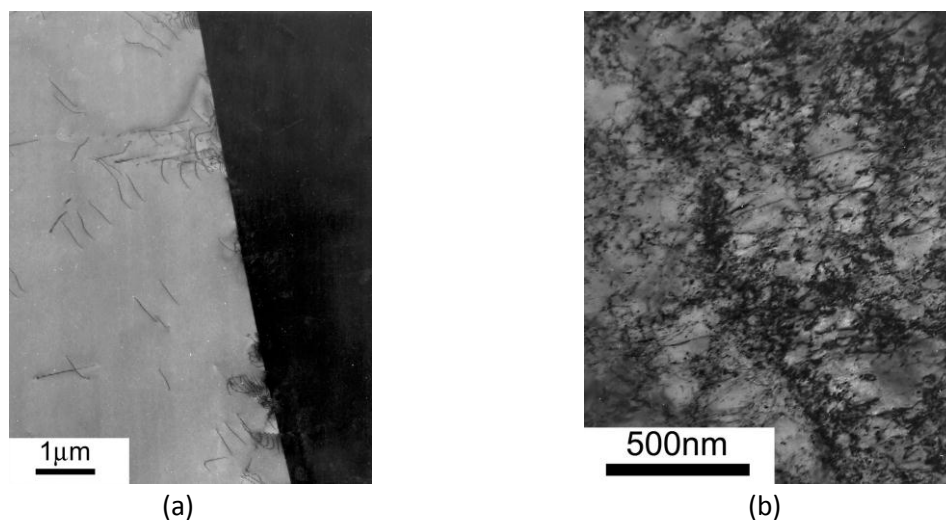


Figure 1.1 : Aspects microstructuraux en MET des aciers étudiés. (a) 304L Hyp ; (b) 316 E [Pokor (2003)].

Les aciers inoxydables austénitiques présentent un comportement élasto-viscoplastique. La **Figure 1.2** représente les courbes de traction des aciers 304 Hyp et 316 Hyp dans une large gamme de température entre  $-150^{\circ}\text{C}$  et  $450^{\circ}\text{C}$ , réalisés à une vitesse de déformation de  $10^{-3}\text{s}^{-1}$ . A basse température ( $-150^{\circ}\text{C}$ ,  $-100^{\circ}\text{C}$  et  $-50^{\circ}\text{C}$  sur la figure), une transformation martensitique intervient pour l'acier 304. Pour une température supérieure à la température ambiante, on observe une diminution de la limite d'élasticité et de l'allongement uniforme quand la température augmente. L'allongement après striction est relativement faible par rapport à l'allongement total. Entre  $200^{\circ}\text{C}$  et  $400^{\circ}\text{C}$ , l'influence de la température sur les propriétés mécaniques devient moins importante.

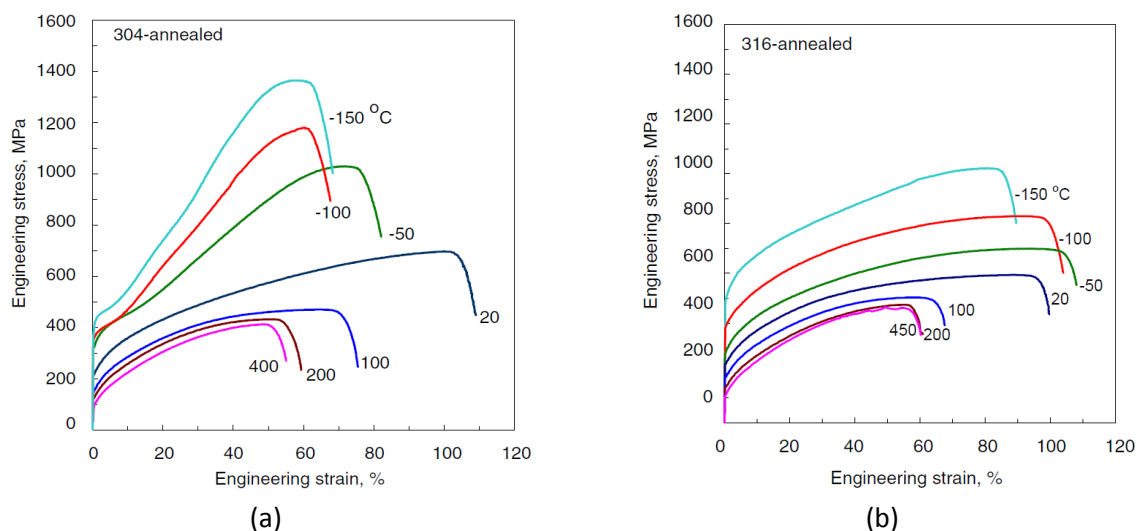


Figure 1.2 : Courbes de traction conventionnelles des aciers inoxydables austénitiques (a) 304 Hyp ; (b) 316 Hyp, obtenues pour des températures entre  $-150$  et  $450^{\circ}\text{C}$ , pour une vitesse de déformation de  $10^{-3}\text{s}^{-1}$ . [Byun et al. (2004)].

Sur la **Figure 1.2**, avec une augmentation de la température et pour une vitesse de déformation fixée à  $10^{-3} \text{ s}^{-1}$ , une forte augmentation du taux d'écrouissage pour les matériaux 304 Hyp et 316 Hyp est observée entre 20°C et 200°C. Par contre, entre 200°C et 450°C, le taux d'écrouissage reste quasiment constant. En outre, la sensibilité de la contrainte à la vitesse de déformation est positive à 20°C alors qu'elle devient négative à 400°C, avec une présence d'instabilités plastiques (effet Portevin-Le Chatelier) sur la courbe de traction (**Figure 1.3**). La sensibilité instantanée de la contrainte à la vitesse de déformation est très faible mais le vieillissement dynamique modifie fortement l'écrouissage [Kashyap et al. (1988), Shi et Northwood (1995), Samuel et al. (2002) et Garnier (2007)].

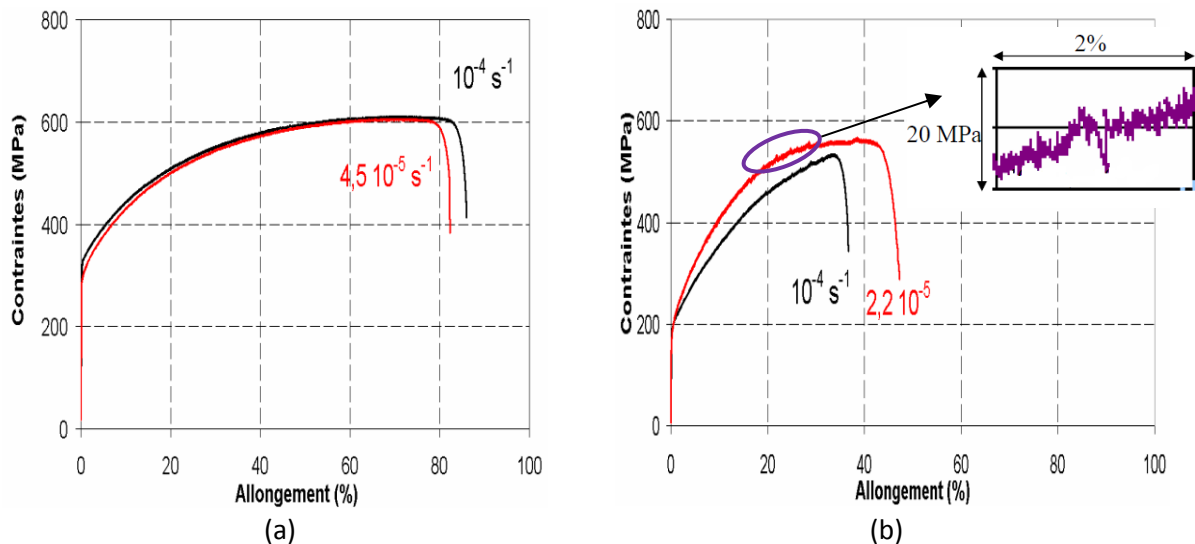


Figure 1.3 : Courbes de traction conventionnelles à différentes vitesses de déformation pour la nuance 304, (a) à 20°C, (b) à 400°C [Garnier (2007)].

Selon les différentes études, le phénomène de vieillissement dynamique pour les aciers austénitiques inoxydables à l'état non-irradié apparaît pour des températures entre 200°C et 800°C, dans une gamme de vitesse de déformation assez large (de  $10^{-1} \text{ s}^{-1}$  jusqu'à  $10^{-7} \text{ s}^{-1}$ ). Quelques études du phénomène de PLC sur d'autres aciers inoxydables austénitiques sont reportées dans le **Tableau 1.3**.

Aciers AISI de la série 300	Référence
304, 304L, 303	de Almeida et al. (1998)
310	Shi et Northwood (1995)
316L, 316NG	Ehrnstén et al. (2005)
304, 316, 316LN	Byun et al. (2004)
316L	Kashyap et al. (1988)

Tableau 1.3 : Etudes du vieillissement dynamique sur différentes aciers inoxydables austénitiques.

## 1.2 Effets d'irradiation

### 1.2.1 Quelques notions : irradiation neutronique, réacteurs nucléaires

L'irradiation neutronique au sein des réacteurs nucléaires peut être caractérisée par différents paramètres : le spectre d'énergie, le flux et la fluence.

Le spectre d'énergie représente la répartition en énergie du nombre de neutrons par unité de temps et de surface. Dans un REP, le spectre d'énergie peut être très large, jusqu'à environ 10-20MeV (Figure 1.4). Dans ce spectre, on peut distinguer trois domaines énergétiques : un domaine thermique avec l'énergie des neutrons  $E < 1\text{eV}$ , un domaine rapide avec  $E > 0.1\text{MeV}$  (voire 1MeV) et entre ces deux domaines un domaine intermédiaire de ralentissement, dans lequel le spectre est dit mixte.

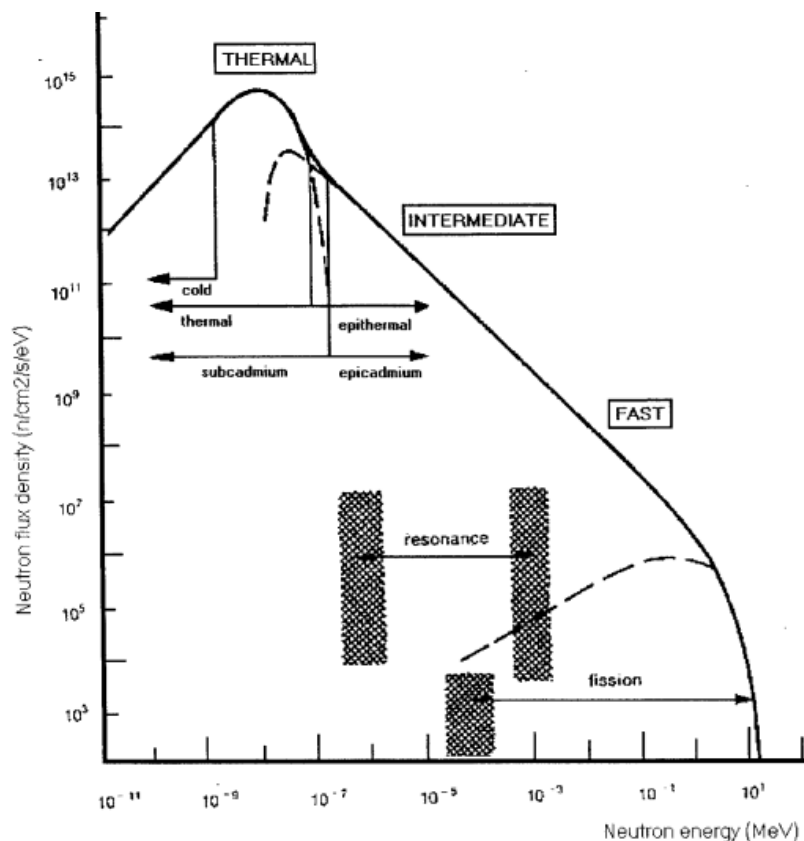


Figure 1.4 : Spectre neutronique pour un REP typique [IAEA (1970)].

Le flux neutronique représente le nombre de neutrons d'un certain domaine énergétique reçu par le matériau, au travers une surface unitaire pendant une seconde. Il dépend de la position au sein d'un réacteur. La fluence est l'intégrale du flux sur le temps. Pour caractériser le dégât d'un matériau irradié considéré, on introduit ici la notion de dose d'irradiation en déplacement par atome (dpa), qui compte le nombre de déplacements que subit chaque atome dans son réseau cristallin, donnée par le produit de la section efficace de déplacement effectif moyennée sur le spectre d'énergie et de la fluence.

Conventionnellement, on considère que seuls des neutrons rapides peuvent provoquer les principaux défauts ponctuels au sein d'un matériau. Par conséquent, les paramètres sont relatifs aux neutrons rapides qui possèdent des énergies supérieures à 0.1MeV (on considère  $E > 1\text{MeV}$  en France, pour les neutrons rapides).

Un REP a un spectre mixte, avec un flux maximal de  $1 \cdot 10^7 \text{ dpa/s}$ . Afin de réaliser des expériences pour étudier l'évolution des propriétés mécaniques et de la microstructure des aciers inoxydables austénitiques sous irradiation, un moyen direct est d'utiliser des composants remplacés au sein du cœur du REP (e.g. des vis de liaison) ou des échantillons du programme de surveillance placés dans des capsules d'irradiation situées à l'extérieur de l'enveloppe de cœur. Une autre façon de faire est de

simuler un environnement d’irradiation par le bombardement à l’aide d’autres particules, ou de réaliser des essais sur les échantillons irradiés en réacteurs expérimentaux, qui permettent de comparer et d’analyser des résultats des essais selon différentes conditions d’irradiation. Les conditions d’irradiation pour quelques réacteurs expérimentaux et pour les REP sont présentées dans le **Tableau 1.4**. Grâce à un fort flux neutronique et à un spectre très énergétique, les Réacteurs à Neutrons Rapides (RNR) peuvent fournir une anticipation des endommagements microstructuraux à la fin de durée de fonctionnement des REP. Par contre, le réacteur OSIRIS qui est aussi un réacteur à spectre mixte, permet de simuler qualitativement les conditions d’irradiation dans les REP, y compris la production d’hélium et d’hydrogène par les transmutations du Nickel et du Bore. Les taux de production d’Hélium par les réacteurs à spectre mixte (~15appm/dpa) sont beaucoup plus élevés que ceux des RNR. Après 40 ans de fonctionnement, la dose maximale reçue par les composants des internes de cuve est estimée à 100dpa.

Réacteur	Type	Temp. (°C)	Flux (dpa/s)
EBR-II (USA)	Neutrons rapides	~375	~1.4 10 <sup>-6</sup>
BOR-60 (Russie)	Neutrons rapides	~330	~9.4 10 <sup>-7</sup>
PHENIX (France)	Neutrons rapides	~385	~1 10 <sup>-6</sup>
OSIRIS (France)	Neutrons à spectre mixte	~330	~2.9 10 <sup>-7</sup>
REP	Neutrons à spectre mixte	280~380	~0.8 10 <sup>-7</sup>

Tableau 1.4 : Conditions d’irradiation pour quelques réacteurs expérimentaux et pour les REP.

Pour les composants dans un réacteur, en comptant tout le spectre d’énergie des neutrons, un dommage de 1dpa est équivalent à une fluence ( $E > 1\text{MeV}$ ) de  $6.5 \cdot 10^{20} \text{ n/cm}^2$  en REP et REB (**Figure 1.5**) et à une fluence de  $3.6 \cdot 10^{20} \text{ n/cm}^2$  en RNR [Lemaignan (2004)].

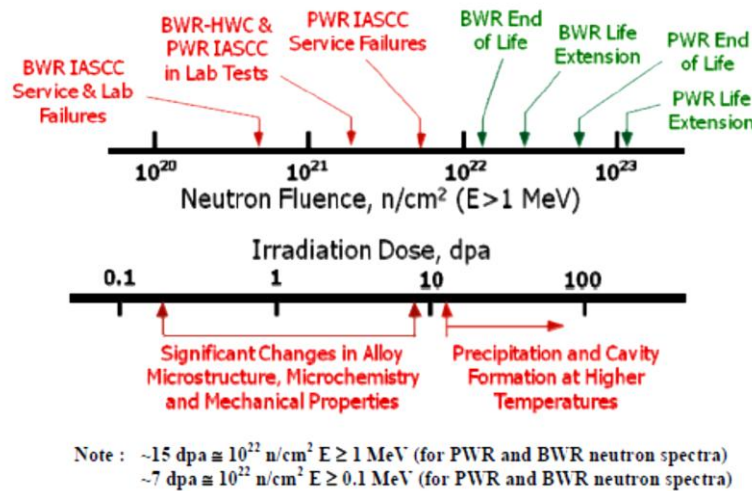


Figure 1.5 : Conversion fluence-dose en REP et REB [Bruemmer et al. (1999)].

### 1.2.2 Evolution des propriétés mécaniques due à l’irradiation

On ne s’intéresse ici qu’à l’effet d’irradiation sur les propriétés mécaniques des aciers inoxydables austénitiques en comportement monotone, à une température entre 250°C et 400°C. En raison d’une modification microstructurale sous irradiation (qui sera détaillée dans la section suivante), l’évolution macroscopique des propriétés mécaniques des aciers inoxydables austénitiques irradiés peut se traduire par :

- un durcissement,
- une perte de ductilité,
- une localisation de la déformation plastique,
- une perte de ténacité.

D'une manière générale, l'irradiation provoque un durcissement par une augmentation de la limite d'élasticité, et une diminution de la ductilité des aciers austénitiques. Pour les faibles doses jusqu'à une dizaine de dpa, et dans le domaine de température qui nous intéresse, le matériau montre une forte augmentation de la limite d'élasticité s'accompagnant d'une forte perte de ductilité. Au-delà d'une dose critique, une saturation de ces effets peut être observée (**Figure 1.6** et **Figure 1.7**). L'allongement uniforme devient très faible après la saturation, c'est-à-dire que la limite d'élasticité et la contrainte ultime sont quasiment égales. Les matériaux irradiés présentent toujours, à moyennes vitesses de déformation ( $\sim 10^{-3} s^{-1}$ ), un comportement ductile, avec une phase d'adoucissement en raison de la localisation de la déformation plastique. L'allongement total se stabilise à environ 10%. On remarque que la saturation des propriétés mécaniques due à l'irradiation est légèrement plus rapidement atteinte pour les matériaux 304 que pour les matériaux 316 [Brager et al. (1984)].

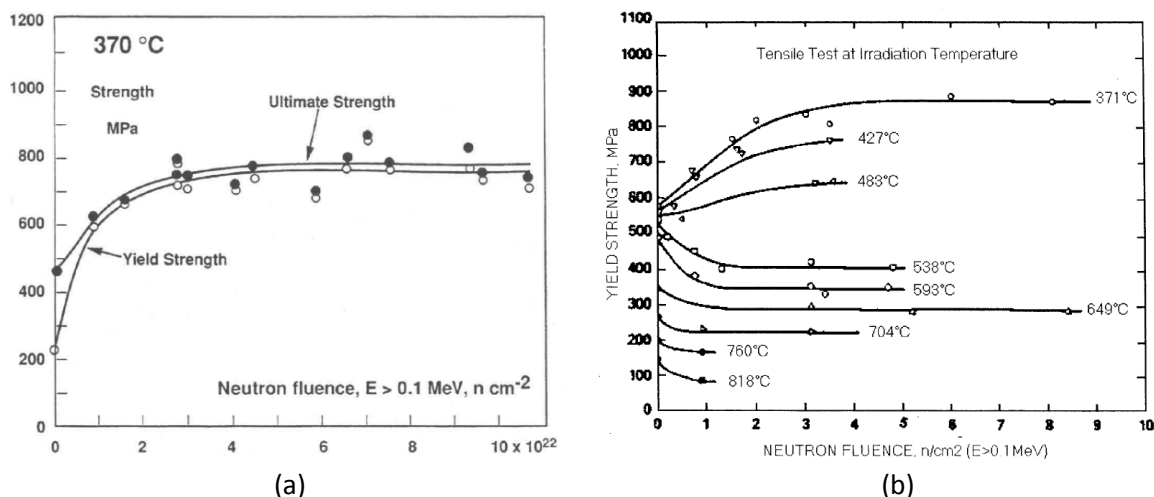


Figure 1.6 : (a) Evolution de la limite d'élasticité et de la limite à la rupture en fonction de la fluence pour le matériau 304L irradié à 370°C dans EPR-II [Holmes et Straalsund (1977)], (b) Evolution de la limite d'élasticité en fonction de la fluence pour le matériau 316L irradié à différentes températures [Garner et al. (1981)].

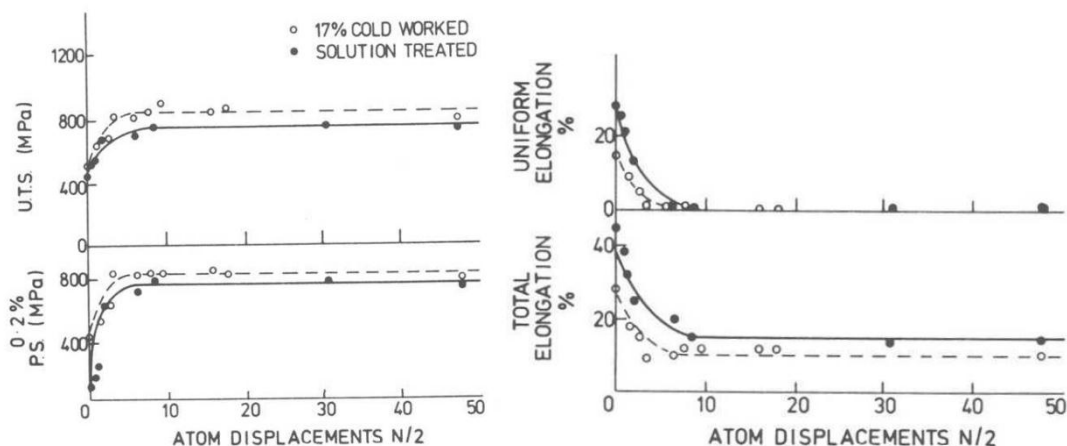


Figure 1.7 : Evolution des propriétés mécaniques en fonction de la dose pour le matériau 316L irradié à l'état écroui ou hypertrempé à 300°C [Bagley et al. (1987)].

L'effet de la vitesse de déformation sur la contrainte des aciers austénitiques irradiés est moins remarquable qu'à l'état non-irradié. La **Figure 1.8** représente les courbes de traction à 320°C pour 2 vitesses, d'un acier stabilisé au titane 08Kh18N10T, dont la composition chimique est proche de celle de l'acier AISI 321, irradié dans un réacteur russe VVER 440. Bien que la sensibilité de la contrainte à la vitesse de déformation soit très faible au niveau de la limite d'élasticité et de la résistance mécanique, la phase d'adoucissement est modifiée. On présente les données concernées dans le **Tableau 1.5** sur l'influence de la vitesse sur les propriétés mécaniques de l'acier 304L irradié à 8.1dpa et à 375°C dans le réacteur expérimental EBRII à l'INL (USA). Les résultats confirment que dans une large gamme de vitesse, le comportement mécanique du matériau est peu sensible à la vitesse de déformation.

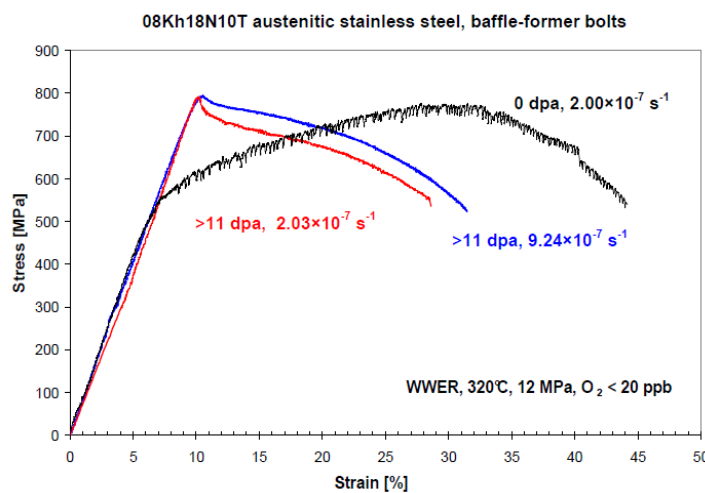


Figure 1.8 : Courbes de traction conventionnelles, réalisées par les échantillons des vis renfort-cloison, dans un réacteur VVER, essai en milieu simulé VVER à 320°C [Ernestová et al. (2010)].

$\dot{\epsilon}$ (s <sup>-1</sup> )	R <sub>e0.2</sub> (MPa)	R <sub>m</sub> (MPa)	A <sub>u</sub> (%)
1. 10 <sup>-1</sup>	721	729	0.41
3. 10 <sup>-4</sup>	710	716	0.34
1. 10 <sup>-6</sup>	706	722	0.40

Tableau 1.5 : Effet de la vitesse de déformation sur les propriétés mécaniques de l'acier 304L irradié à 8.1dpa et à 375°C, et testé à 375°C dans le réacteur EBRII [Garnier (2007)].

La température d'irradiation est l'un des facteurs qui influence le plus les propriétés mécaniques des aciers inoxydables austénitiques. On reporte sur la **Figure 1.9(b)** l'évolution de la limite d'élasticité en fonction de la fluence pour l'acier 316L à différentes températures d'irradiation. Il est à noter que la limite d'élasticité du matériau irradié évolue avec la température d'irradiation, ce qui peut être interprété par deux phénomènes physiques [Holmes et Straalsund (1977)] :

- T<sub>irr</sub> < 500°C : un durcissement dû à la création des défauts de l'irradiation ;
- T<sub>irr</sub> > 500°C : un adoucissement induit par la restauration thermique de l'écroûissage ;
- T<sub>irr</sub> ≈ 500°C : une compétition de ces deux phénomènes physiques.

La **Figure 1.9(a)** montre l'effet de la température d'irradiation sur la limite d'élasticité de différents aciers austénitiques irradiés entre 10 et 15dpa. Dans l'intervalle des températures entre 250°C et 400°C, la limite d'élasticité ne varie pas beaucoup. Le durcissement maximal est atteint au voisinage de 300°C. Une faible influence de la température d'irradiation à 20°C et 277°C sur le

durcissement calculé par  $\Delta\sigma_{0.2} = \sigma_{0.2}^{\text{irradié}} - \sigma_{0.2}^{\text{non-irradié}}$  est aussi montré sur la **Figure 1.9(b)**, pour les aciers 304L et 316L.

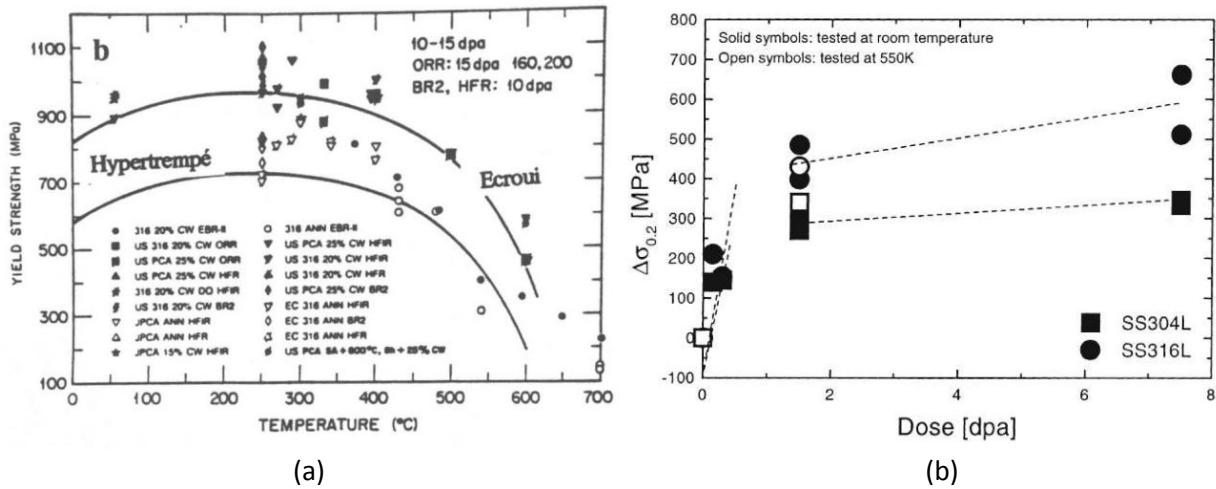


Figure 1.9 : (a) Effet de la température d’irradiation sur la limite d’élasticité des aciers austénitiques irradiés [Odette et Lucas (1991)], (b) Variation du durcissement avec la dose pour les matériaux 304L et 316L, à température ambiante et à 550K. Les températures d’irradiation et d’essai sont identiques [Bailat et al. (2000)].

Les **Figure 1.10** et **Figure 1.11** représentent l’évolution des propriétés mécaniques en fonction de la température d’essai, pour les aciers 316 et 304 irradiés à 466°C et 370°C. La limite d’élasticité décroît avec l’augmentation de la température d’essai. L’allongement uniforme et l’allongement total diminuent fortement quand la température d’essai est inférieure à celle d’irradiation. Pour une température d’essai plus élevée, la diminution de l’allongement total devient faible.

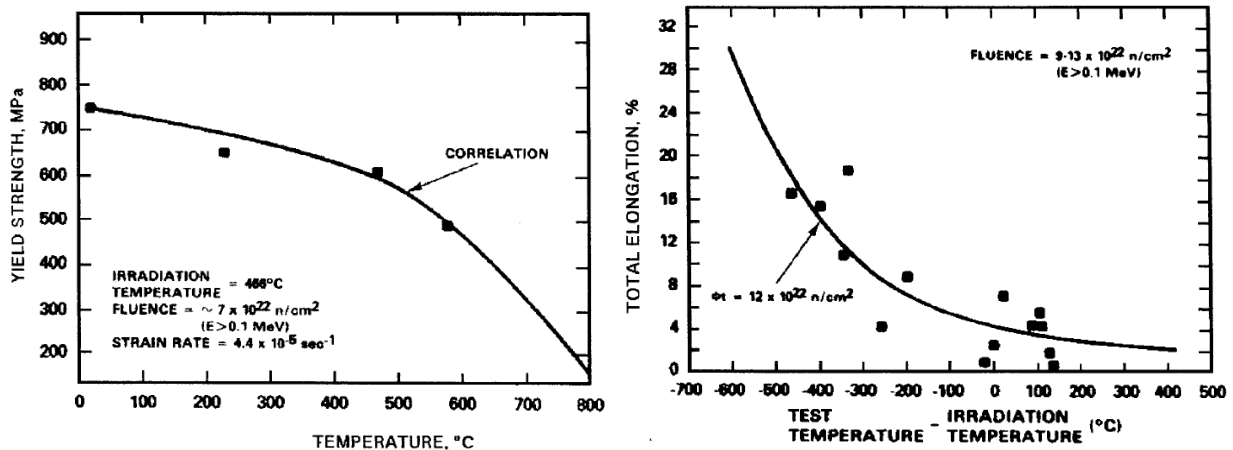


Figure 1.10 : Effet de la température d’essai sur la limite d’élasticité et l’allongement total d’un acier 316 irradié à 466°C [Hamilton et al. (1982)].

Sur les **Figure 1.12** et **Figure 1.13**, on présente les courbes de traction des aciers inoxydables austénitiques 304L Hyp, 316L Hyp et 316 E données dans les littératures [Averty et al. (1998), Averty et al. (1999), Alamo et al. (2000), Brachet et al. (2001), Pokor (2003), Pokor et al. (2004a) et Pokor et al. (2004b)]. Les matériaux étudiés sont irradiés dans les réacteurs OSIRIS et BOR-60, à 330°C. Ces résultats montrent un très bon accord avec l’évolution des propriétés mécaniques présentée dans cette section.

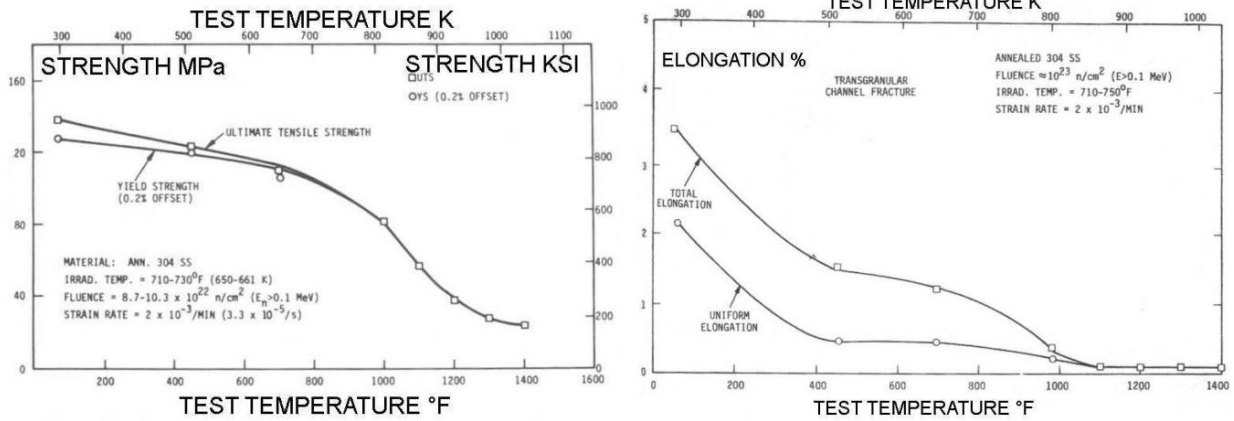


Figure 1.11 : Effet de la température d'essai sur la limite d'élasticité et l'allongement uniforme d'un acier 304 irradié à 370°C [Fish et Hunter (1976)].

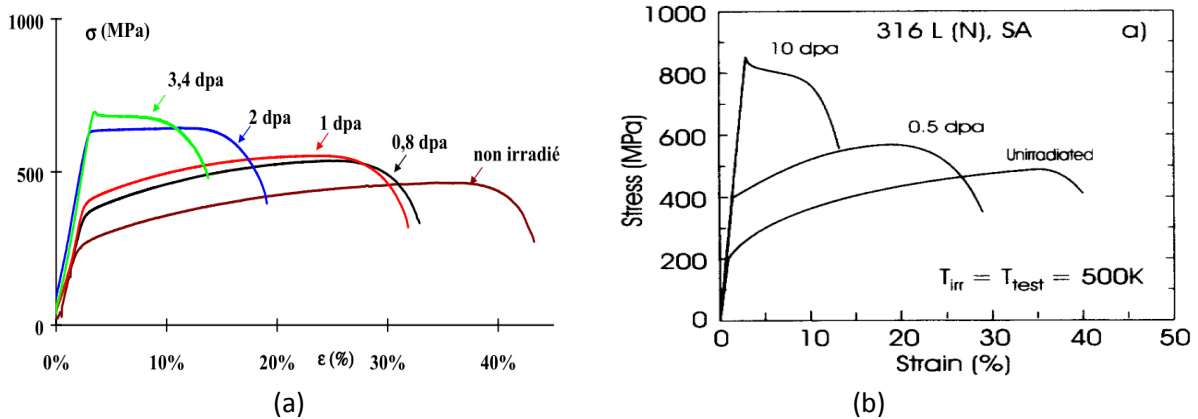


Figure 1.12 : Courbes de traction : (a) d'un acier 304L Hyp, irradiés à différentes doses dans OSIRIS à 330°C et testés à 330°C, avec le module d'Young non corrigé [Pokor (2003) et Pokor et al. (2004a)], (b) d'un acier 316L Hyp, irradiés à différentes doses [de Vries (1990)].

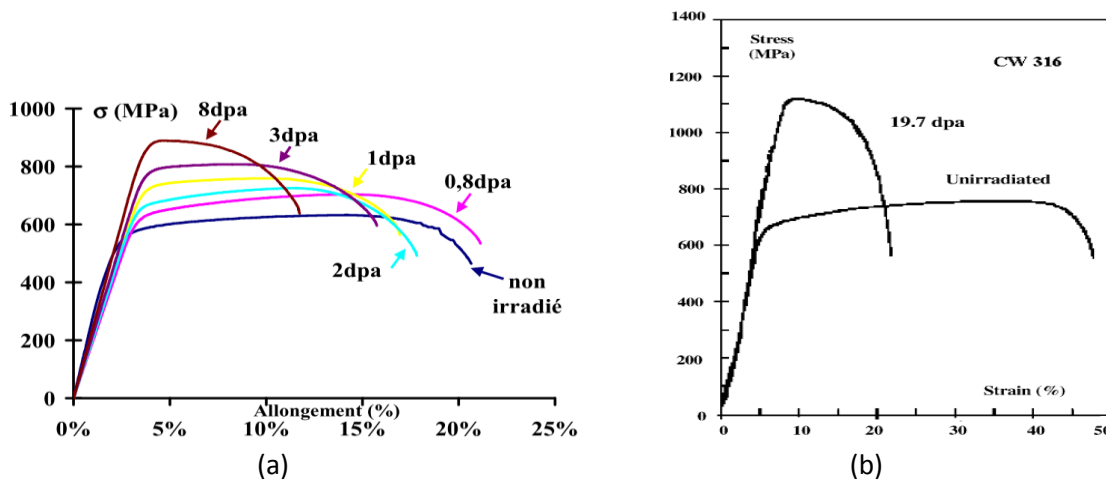


Figure 1.13 : Courbes de traction : (a) d'un acier 316 E, irradiés à différentes doses dans OSIRIS à 330°C et testés à 330°C, avec le module d'Young non corrigé [Pokor (2003)], (b) d'un acier 316 E, irradiés à différentes doses dans BOR-60 à 330°C et testés à 330°C [Pokor et al. (2004b)].

La forte diminution de la ductilité due à l'irradiation a une implication significative sur la perte de ténacité dans les aciers austénitiques [Lucas et al. (1996)]. Cependant, cette dernière est très peu étudiée, spécialement dans les conditions d'irradiation des REP. Quelques données sur la variation de



la valeur critique de l'énergie à la rupture  $J_Q$  (ou  $J_{Ic}$ ) des aciers 304, 304L et 316 avec la fluence sont présentées sur la **Figure 1.14**. On note ici que  $J_{Ic}$  peut être directement liée à la ténacité  $K_{Ic}$ , par la formule :  $J_{Ic} = K_{Ic}^2(1-2\nu)/E$ , avec  $E$  le module de Young et  $\nu$  le coefficient de Poisson. On observe une forte perte de la ténacité des aciers austénitiques quand la fluence augmente.  $J_Q$  (ou  $J_{Ic}$ ) présentent une dépendance similaire avec la fluence. Comme le montre le **Tableau 1.6**, la ténacité  $K_c$  des aciers de type 316 à des doses de 4dpa et 10dpa ne change pas beaucoup. Un régime stationnaire est probablement atteint. L'effet de la température sur la ténacité à la rupture est présenté sur le **Figure 1.15**. Pour une température supérieure à environ 100°C, la ténacité à la rupture  $J_Q$  de l'acier 316 irradié à 3dpa décroît quand la température augmente.

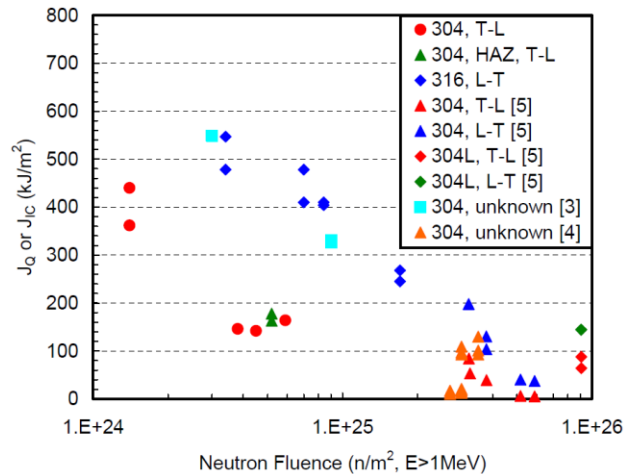


Figure 1.14 : Effet de la fluence sur la ténacité à la rupture des aciers 304, 304L et 316, selon différentes orientations des éprouvettes CT. Les échantillons testés dans la littérature présentée sont irradiés dans un BWR, et testés à 288°C. Les conditions d'irradiation et d'essai des données issues d'autres littératures ne sont pas être précisées [Torimaru et al. (2010)].

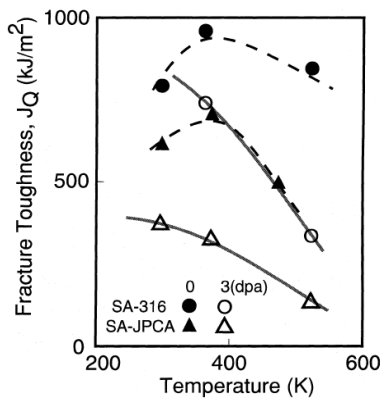


Figure 1.15 : Effet de la température sur la ténacité des aciers 316 et JPCA, non-irradiés et irradiés à 3dpa dans le réacteur HFR [Jitsukawa et al. (1999)].

Acier	Dose (dpa)	$T_{test}$ (°C)	$K_c$ (MPa.m <sup>1/2</sup> )
316L-Ti	~4	265	47
	~10		47
316L(N)	~4		46
	~10		37

Tableau 1.6 : Paramètre de la ténacité pour les aciers de type 316, irradiés à 4dpa et 10dpa dans le réacteur expérimental russe SM-2, testés à 265°C [Rodchenkov et al. (2009)].

### 1.2.3 Evolution microstructurale lors de l'irradiation

Comme pour la section précédente, on ne s'intéresse ici qu'à la microstructure induite par l'irradiation, dans les aciers inoxydables austénitiques, à une température entre 250 et 400°C.

Lors de l'irradiation neutronique dans les réacteurs, la fission nucléaire produit des interactions entre les neutrons incidents et les atomes du métal irradié, conduisant à une formation de défauts ponctuels dans le réseau cristallin. Si le neutron est assez énergétique ( $>40\text{eV}$  pour les aciers inoxydables), il peut se produire un déplacement d'atome, ce qui permet de créer simultanément une paire de défauts ponctuels de Frenkel : une lacune et un auto-interstitiel. Si cet atome primaire du matériau (en anglais, PKA : *primary knock-on atom*) possède assez d'énergie pour réaliser des collisions avec d'autres atomes dans le réseau cristallin, on parle d'une cascade de déplacements, ce qui entraîne un certain nombre de lacunes et d'interstitiels. Pour les aciers inoxydables austénitiques utilisés comme matériaux des internes de cuve, la dose maximale reçue jusqu'à la fin de sa durée de fonctionnement nominale peut atteindre 100dpa, c'est-à-dire que chaque atome dans le matériau se déplace en moyenne 100 fois.

Dans la gamme de températures moyennes ( $0.2T_{\text{fusion}} < T < 0.5T_{\text{fusion}}$ ), les défauts ponctuels peuvent évoluer par la migration de ces défauts. Influencés par la température, la densité des puits (cavités, dislocations, boucles de dislocations, joints de grains, surfaces libres ou précipités) et le flux, ils vont pouvoir produire une recombinaison, une annihilation sur les puits, ou une agglomération pour former des défauts plans ou volumiques. Les principales évolutions microstructurales induites par l'irradiation en moyenne température sont présentées ci-dessous :

- l'évolution du réseau initial de dislocations
- la formation d'une nouvelle microstructure de dislocations
- la formation des bulles de gaz ou/et des cavités
- la ségrégation sur les puits
- la précipitation de seconde phase
- la formation de bandes claires

### 1.2.3.1 Evolution du réseau initial de dislocations

L'étude de la microstructure sur l'acier de type 316 E irradié montre que le réseau initial de dislocations associé à l'érouissage tend à disparaître lorsque la dose d'irradiation augmente [Azam et al. (1973), Maziasz (1992), Boulanger et al. (1996), Pokor et al. (2004c) et Edwards et al. (2009)]. La microstructure initiale du matériau est constituée de macles et de dislocations organisées en cellules, selon le taux d'érouissage [Boulanger, 1996; Garnier, 2007]. Les dislocations sont considérées comme les puits préférentiels pour les interstitiels à moyenne température, car elles interagissent plus fortement avec le champ de déformations d'un interstitiel qu'avec celui d'une lacune. Ceci provoque leur montée suivie par leur annihilation entre elles ou aux joints de grains. Cependant, le réseau initial de dislocations dans un matériau semble être moins important comme puits préférentiel pour les interstitiels que les dislocations formées au cours de l'irradiation. La restauration du réseau initial de dislocations due à l'érouissage dépend aussi de la température. Pour une température relativement plus élevée ( $>500^\circ\text{C}$ ), la restauration complète du réseau de dislocations d'érouissage semble plus rapide. A  $375^\circ\text{C}$ , les dislocations d'érouissage ont complètement disparu pour une dose de 10dpa, mais les macles initiales sont toujours présentes [Pokor et al. (2004c)]. Des résultats similaires sont aussi observés dans la littérature [Boulanger et al. (1996)], à une température plus élevée ( $600^\circ\text{C}$ ).

A notre connaissance, les seules données de la littérature ouverte concernant des densités du réseau initial de dislocations des aciers inoxydables austénitiques en fonction de la fluence et de la dose sont illustrées respectivement dans la **Figure 1.16(a)** et **(b)**. Ces données sont obtenues pour les matériaux irradiés en RNR, à haute (500°C) et moyenne (320°C) températures. A l'état non-irradié, les densités du réseau initial de dislocations sont de  $4 \cdot 10^{12} \text{m}^{-2}$  et  $7 \cdot 10^{15} \text{m}^{-2}$  pour l'état hypertrempé et écroui sur la **Figure 1.16(a)** [Garner and Wolfer (1982)], et de  $10^{10} \text{m}^{-2}$  et  $10^{14} \text{m}^{-2}$  pour l'état hypertrempé et écroui sur la **Figure 1.16(b)**. Sur ces deux figures, les densités du réseau de dislocations évoluent avec l'irradiation et puis saturent. Cependant, les évolutions des densités de dislocations pour l'acier hypertrempé présentent une tendance inverse. A haute température, la densité du réseau initial de dislocations pour l'état hypertrempé augmente pour raison du défautement de boucles de Frank (détaillé dans la prochaine section) de taille très grande (>50nm) en boucles parfaites et de l'incorporation de ces boucles parfaites dans le réseau de dislocations. Par contre, à moyenne température, la taille de boucles de Frank (autour de 10nm) est insuffisante pour réaliser le défautement de boucles, le réseau de dislocations tend donc à disparaître lorsque la dose d'irradiation augmente. Pour l'état écroui, peu importe la température d'irradiation, la densité de dislocations diminue par recuit. La densité du réseau de dislocations à la saturation qui est indépendante de l'état initial du matériau, est atteinte à quelques dizaines de dpa.

Dans un environnement REP, la température d'irradiation est au voisinage de 330°C. La densité et la taille de boucles de Frank observées en REP sont très comparables avec celles observées en BOR-60. On considère donc que la **Figure 1.16(b)** peut mieux représenter l'évolution du réseau initial de dislocations.

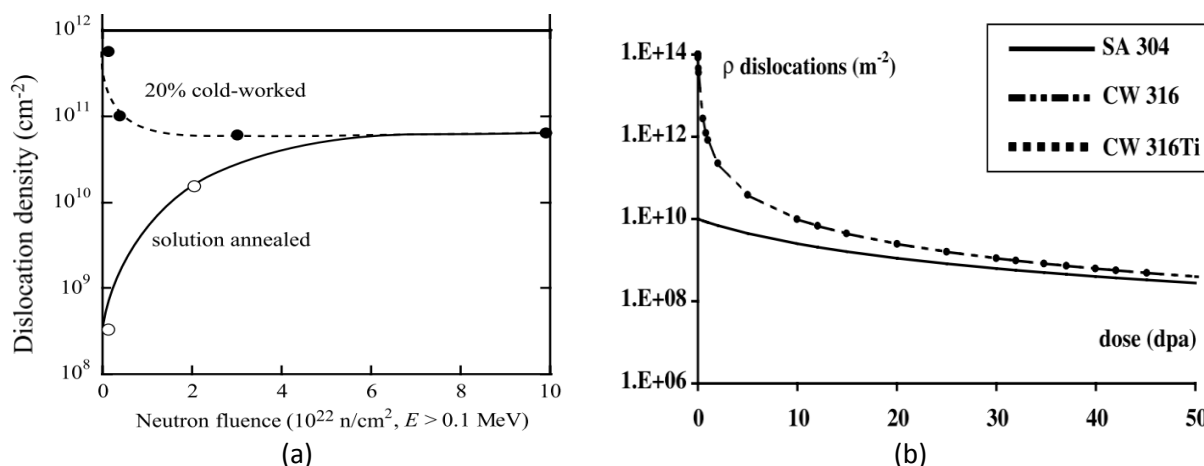


Figure 1.16 : Densités initiales de dislocations en fonction de la fluence d'irradiation (ou de la dose), pour (a) les aciers 316 hypertrempé et écroui, irradiés dans EBR-II (RNR) à 500°C [Garner (1994)], (b) l'acier 304L Hyp, 316 E et 316Ti E, irradié dans BOR-60 (RNR) à 320°C (ou dans OSIRIS (REP) à 330°C) [Pokor et al. (2004c)].

### 1.2.3.2 Formation d'une nouvelle microstructure de dislocations

Les défauts principalement formés au cours de l'irradiation dans différents matériaux de structure cubique à faces centrées (CFC) ont été étudiés (**Tableau 1.7**), soit par moyen expérimental en Microscopie Electronique en Transmission (MET), soit par moyen numérique en Dynamique Moléculaire (DM).

Matériau	Défaut d'irradiation	Références
Aciers inoxydables austénitiques/palladium	Boucles de Frank de type interstitiel	[Foster et al. (1995)] [Boulanger et al. (1996)] [Victoria et al. (2000)]
Aluminium hypertrempé	Boucles de Frank de type lacunaire	[Strudel et Washburn (1964)]
Cuivre hypertrempé/or hypertrempé	Tétraèdres de fautes d'empilement	[Zinkle et Matsukawa (2004)] [Osetsky et al. (2006)] [Victoria et al. (2000)]

Tableau 1.7 : Quelques études sur différents défauts formés au cours de l'irradiation dans divers matériaux de structure CFC.

Dans les aciers inoxydables austénitiques irradiés de structure CFC, dans une gamme de température entre 280°C et 380°C, on observe souvent simultanément plusieurs types de microstructures de dislocations : les dislocations parfaites, les "black dots" et les boucles de Frank. A partir d'observations au MET, bien que l'énergie de faute d'empilement dans les matériaux CFC soit relativement faible, on montre que la proportion de tétraèdres de faute d'empilement de taille nanométrique observés (en anglais, SFT : *Stacking Fault Tetrahedra*) est inférieure à 1% de la densité totale d'amas présents dans un acier 304L [Zinkle et Sindelar (1988) et Victoria et al. (2000)]. Une explication pour cette faible proportion de SFT est synthétisée par [Pokor (2003)] à partir de plusieurs publications : les amas lacunaires conduisent à la formation de cavités ou/et de bulles de gaz dans les aciers inoxydables austénitiques.

Les dislocations parfaites ont été observées en MET dans les aciers 304L Hyp à l'état irradié, sous forme de nombreux segments de lignes de dislocation [Renault et al. (2010) et Renault et al. (2011)] (**Figure 1.17**). La distribution spatiale de ces segments de dislocations qui se situent souvent à proximité des boucles de Frank est homogène. Selon Renault, sous irradiation, ces dislocations parfaites observées correspondent à celles formées lors de l'accumulation des défauts induits par irradiation plutôt qu'à la rémanence des dislocations issues de l'érouissage. En plus, la microstructure de dislocations parfaites passe de son réseau initial pour les aciers hypertrempés ou érouis à une microstructure contenant des segments de lignes de dislocation formée au cours d'irradiation.

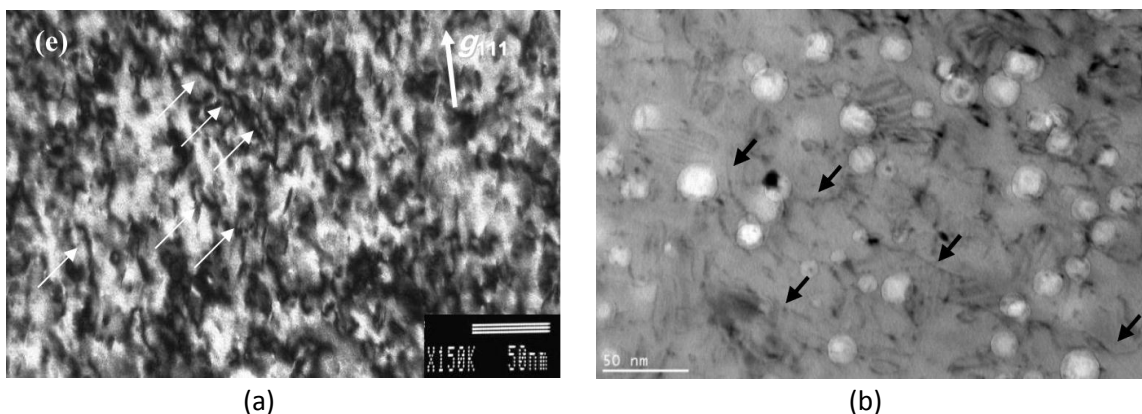


Figure 1.17 : Observations de dislocations parfaites en MET, (a) indiquées par les flèches blanches, dans un acier 304 E irradié à 21.6dpa à 320°C, dans le réacteur BOR-60 (RNR) [Renault et al. (2010)] ; (b) indiquées par les flèches noires, dans un acier 304L Hyp irradié à 36dpa à 390°C, dans le réacteur PHENIX (RNR) [Renault et al. (2011)].

Les "black dots" sont des amas de défauts ponctuels de faibles dimensions, souvent inférieurs à 2nm. A cause de ces petites tailles, ces objets apparaissent comme des points noirs non résolus en

MET. Leur nature est encore incertaine. Selon [Zinkle et al. (1993)], les "black dots" sont des petits amas lacunaires. Ils se forment dès une très faible dose. Pour une température inférieure à 350-400°C, leur densité atteint assez rapidement une saturation (de l'ordre de grandeur de  $10^{22}m^{-3}$ ), pour moins de 1dpa. Cependant, lorsque la température est plus élevée (>400°C), les "black dots" présentent une instabilité, ce qui donc conduit à une diminution de leur densité [Maziasz (1993)].

Les boucles de Frank sont des boucles de dislocations fautées qui contiennent une faute d'empilement. Elles sont de nature interstitielle dans les aciers inoxydables austénitiques, situées dans les plans cristallographiques {111} et de vecteur de Burgers  $b=a/3\langle 111 \rangle$ , sous la forme de boucles ellipsoïdales planes ou polygonales planes. Les boucles de Frank fautées sont sessiles ("immobiles" sur leur cylindre de glissement). En fonction de la dose et de la température, ces boucles fautées peuvent croître. Après avoir atteint un diamètre critique (~50nm d'après [Boulanger et al. (1996)]), elles deviennent instables, ce qui provoque leur défautement, et se forment finalement en une partie du réseau de dislocations générales qui sont glissiles (capables de glisser lors d'un glissement pur) [Zinkle et al. (1993)].

La **Figure 1.18** représente le domaine d'existence des "black dots", des boucles de Frank (Frank loops) et le réseau de dislocations pour différentes températures et doses, de l'acier 316 Hyp selon diverses études [Maziasz et Mc Hargue (1987)].

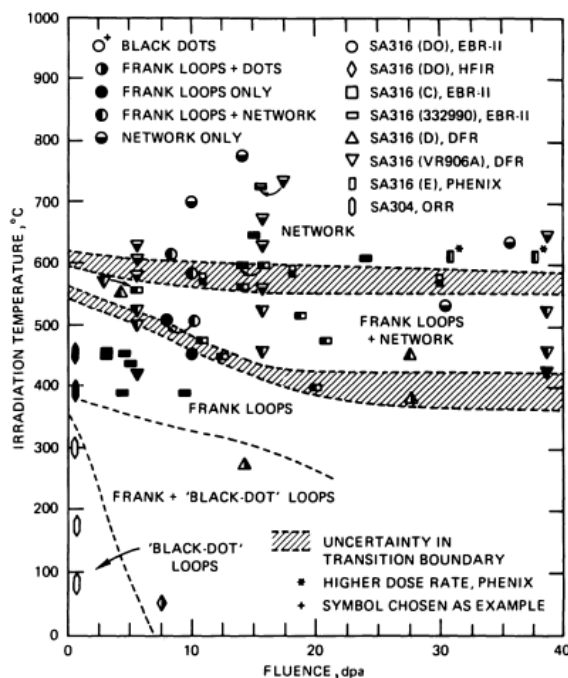


Figure 1.18 : Domaines d'existence de différents défauts d'irradiation, pour l'acier 316 Hyp, à partir d'une compilation des données obtenues en RNR [Maziasz et Mc Hargue (1987)].

La densité et la taille des boucles de Frank évoluent avec la température d'irradiation et la dose. Sur les **Figure 1.19** et **Figure 1.20**, on observe que ces boucles se forment à faible dose (<1dpa). Leur densité et leur taille augmentent avec la dose, et une tendance à la saturation est observée pour une dose au voisinage de 5-10dpa pour les températures d'irradiation entre 385°C et 395°C. Pour les températures supérieures à 500°C, la taille des boucles de Frank diminue après avoir atteint une valeur maximale autour de 5dpa. Ce fait est probablement dû au défautement des boucles de Frank de grandes dimensions. Par ailleurs, la densité des boucles de Frank augmente avec la température

jusqu'à environ 350°C, et ensuite diminue avec l'augmentation de la température d'irradiation, pour former le réseau de dislocations. Ce dernier devient le défaut d'irradiation prépondérant à partir d'une température d'irradiation d'environ 500°C.

Il est à remarquer que l'état métallurgique initial des matériaux (hypertrempé ou écroui) influence très peu la densité de boucles de Frank à partir d'une température d'irradiation de 300°C. A basse température (<250°C), la densité de boucles de Frank dans le matériau écroui est bien inférieure à celle dans le matériau hypertrempé (**Figure 1.19(b)**). Il semble que le réseau initial de dislocations dû à l'érouissage empêche la formation de boucles de Frank à basse température. De plus, la densité de boucles de Frank dans les aciers 304 Hyp et 316 Hyp irradiés à 280°C est quasiment identique, tandis que la taille moyenne de boucles de Frank dans l'acier 316 Hyp est un peu plus grande que celle dans l'acier 304 Hyp [Bruemmer et al. (1999)].

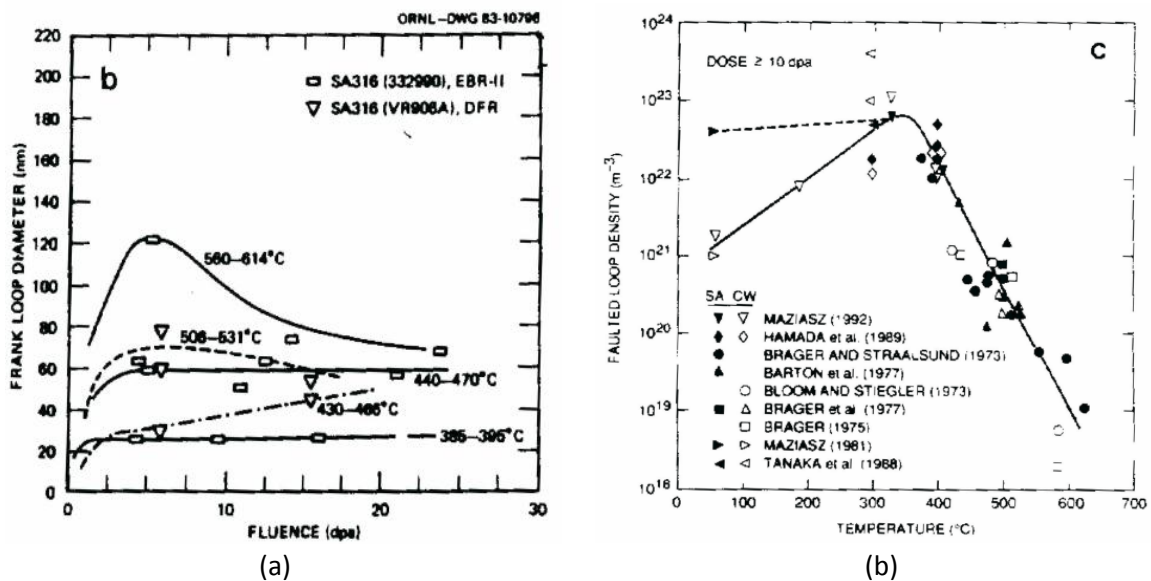


Figure 1.19 : Evolution de la taille et de la densité des boucles de Frank pour des aciers 316, (a) leur taille en fonction de la fluence, pour différentes températures, à l'état hypertrempé [Maziasz (1993)], (b) leur densité en fonction de la température d'irradiation, pour les aciers 316 hypertrempés et écrouis [Zinkle et al. (1993)].

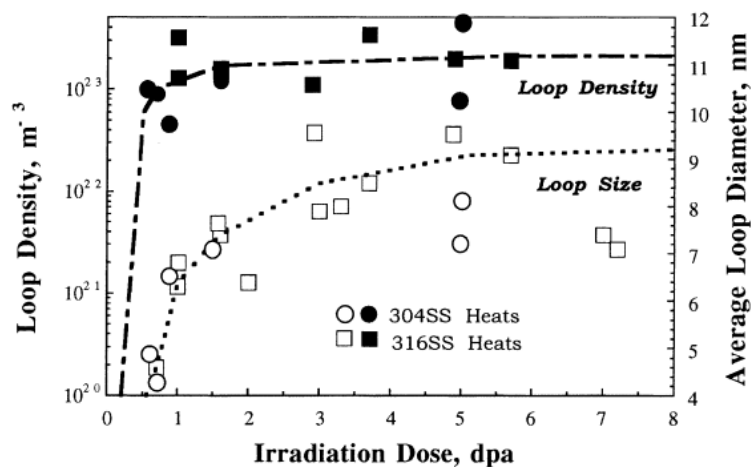


Figure 1.20 : Evolutions de la taille et de la densité de boucles de Frank des aciers 304 et 316 irradiés dans un réacteur à eau légère (REL), à basse température (280°C) [Bruemmer et al. (1999)].

Les "black dots" et les boucles de Frank se distribuent de manière homogène dans les grains (**Figure 1.21**). Selon la littérature [Renault et al. (2010)], la densité et la taille de boucles de Frank observées sur différents plans de glissement de type  $\{111\}$  sont très similaires. Cependant, une zone dénuée de défauts d'irradiation à proximité des joints de grains à faibles doses a été observée [Bruemmer (1997), Simonen et al. (1999), Edwards et al. (2003a) et Pokor (2003)], provenant de la capture des défauts d'irradiation dans le joint de grains. Cette zone dans l'acier 304 est moins large que celle dans l'acier 316 pour une dose donnée (**Figure 1.22**). Lorsque la dose augmente, cette zone tend à disparaître. Et à 5-10dpa, on ne la voit plus (**Figure 1.23**).

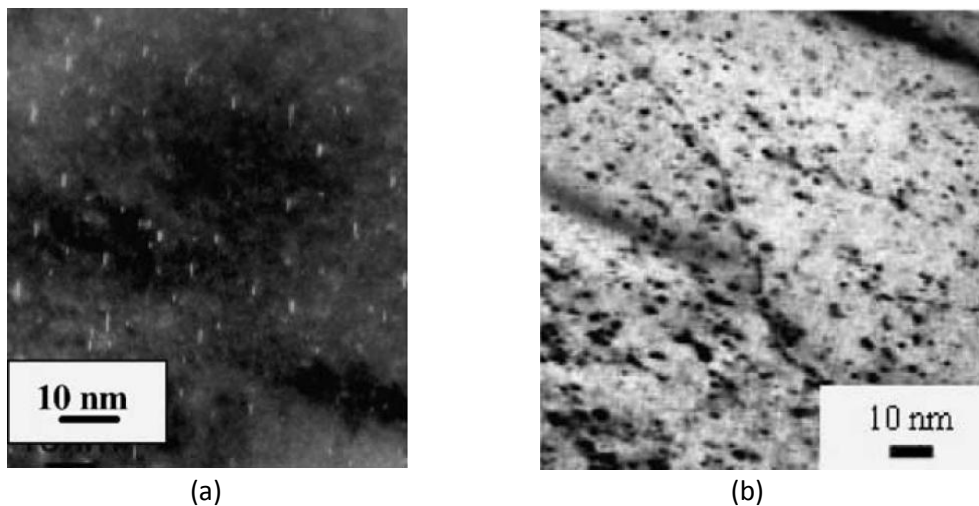


Figure 1.21 : (a) Boucles de Frank, (b) "black dots" dans un acier 304 Hyp irradié à 0.8dpa, à 330°C [Pokor et al. (2004c)].

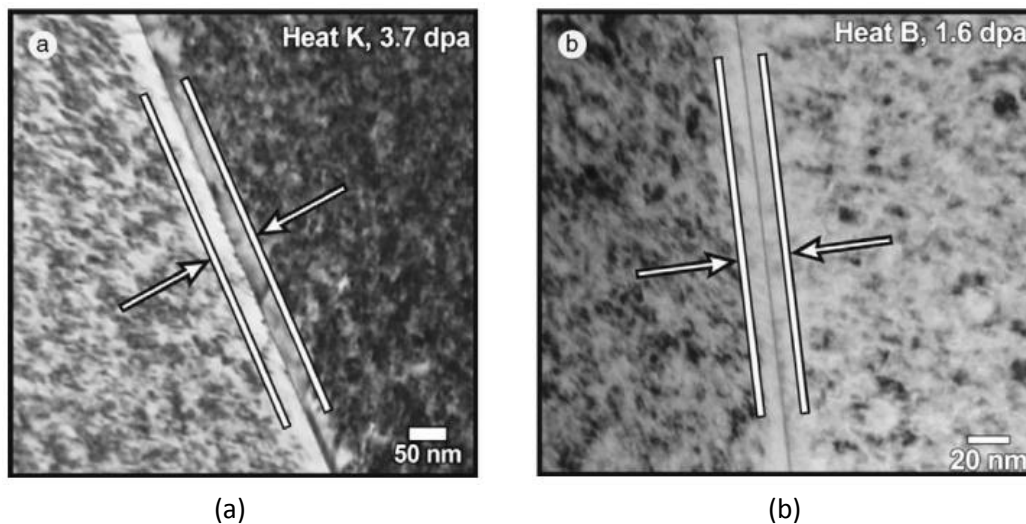


Figure 1.22 : Zones de dénuée de défauts d'irradiation dans les aciers inoxydables austénitiques, irradiés dans un REL, à 275°C (a) acier 316, irradié à 3.7dpa, (b) acier 304, irradié à 1.6dpa [Edwards et al. (2003a)].

On reporte dans le **Tableau 1.8** une compilation des données sur la densité et la taille des "black dots" et des boucles de Frank dans les aciers 304 et 316, selon diverses références de la littérature.

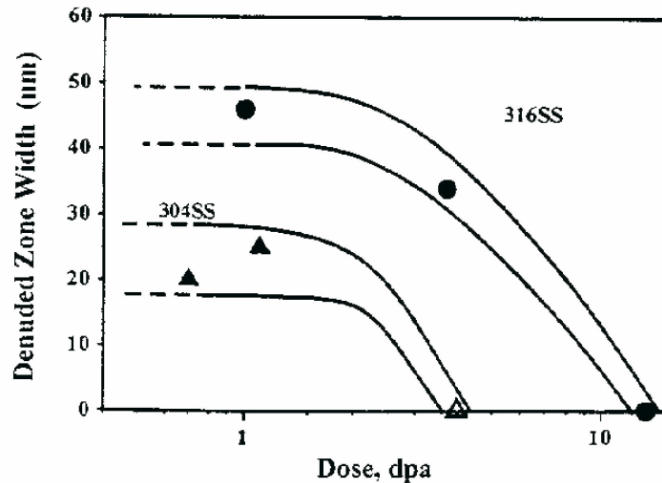


Figure 1.23 : Largeur de la zone dénudée de défauts d'irradiation en fonction de la dose, pour les aciers 304 et 316 [Simonen et al. (1999)].

Matériau	Conditions d'irradiation	Black dots		Frank loops	
		Densité (m <sup>-3</sup> )	Taille (nm)	Densité (m <sup>-3</sup> )	Taille (nm)
J316 <sup>1</sup>	ORR, 7.4dpa, 330°C	1.1 10 <sup>23</sup>	1.2	5.5 10 <sup>22</sup>	8.0
316 <sup>2</sup>	HFIR, 0.79dpa, 65-100°C	3.0 10 <sup>23</sup>	1.8	1.0 10 <sup>23</sup>	3.5
304 Hyp <sup>3</sup>	OSIRIS, 0.8-2-3.4dpa, 330°C	4.1-2.6-/ 10 <sup>22</sup>	4.6-3.5-/	4.5-7.4-6.3 10 <sup>22</sup>	4.7-5.9-7.4
	BOR-60, 20-40dpa, 320°C	-	-	6.3-7.7 10 <sup>22</sup>	7.3-7.0
	EBR-II, 8-10dpa, 375°C	-	-	3.0-3.3 10 <sup>22</sup>	11.5-12.4
316 E <sup>3</sup>	OSIRIS, 0.8-2-3.4dpa, 330°C	/-9.2-/ 10 <sup>21</sup>	/-8.7-/	2.8-2.9-3.1 10 <sup>22</sup>	9.3-7.7-10
	BOR-60, 10-20-40dpa, 320°C	-	-	6.0-4.4-6.2 10 <sup>22</sup>	7.5-7.4-7.3
	EBR-II, 8-10dpa, 375°C	-	-	3.2-3.2 10 <sup>22</sup>	12.1-12.2
316 E <sup>4</sup>	PWR, 33dpa, 290°C	-	-	1.5 10 <sup>23</sup>	8.5
	PWR, 70dpa, 315°C	-	-	7.6 10 <sup>22</sup>	10
316 E <sup>5</sup>	PWR, 7.5dpa, 333°C	-	-	1.2 10 <sup>23</sup>	12.5
	PWR, 12.2dpa, 343°C	-	-	8.5 10 <sup>22</sup>	9.5
	PWR, 19.5dpa, 320°C	-	-	9.2 10 <sup>22</sup>	6.9
304 Hyp <sup>6</sup>	PWR, 35dpa, 310°C	-	-	1.5 10 <sup>22</sup>	10
304 E <sup>7</sup>	PWR, 21.6dpa, 300°C	-	-	2.4 10 <sup>22</sup>	9.8
304L <sup>7</sup>	BOR-60, 86dpa, 320°C	-	-	1.75 10 <sup>22</sup>	9.0
316 <sup>7</sup>		-	-	1.74 10 <sup>22</sup>	8.5
304L <sup>8</sup>	BWR, 7.5dpa, 277°C	-	-	3.0 10 <sup>23</sup>	7.3
316L <sup>8</sup>		-	-	1.7 10 <sup>23</sup>	5.9
304L Hyp <sup>9</sup>	PHENIX, 11dpa, 380°C	-	-	2.7 10 <sup>22</sup>	14.8
	PHENIX, 36dpa, 390°C	-	-	2.8 10 <sup>22</sup>	14
304L Hyp <sup>10</sup>	BOR-60, 60-86-95-120dpa, 330°C	-	-	5.1-7-5.3-6.3 10 <sup>22</sup>	8.7-9-8.8-8.3
316 E <sup>10</sup>	BOR-60, 60-86-95dpa, 330°C	-	-	7.4-7.0-5.6 10 <sup>22</sup>	7-8.5-9.3

Tableau 1.8 : Densités et tailles de black dots et de boucles de Frank, dans les aciers inoxydables austénitiques de type 304 et 316, sous différentes conditions d'irradiation neutronique [Hashimoto et al. (2000)]<sup>1</sup> [Hashimoto et al. (2006)]<sup>2</sup> [Pokor (2003)]<sup>3</sup> [Pokor et al. (2004b)]<sup>3</sup> [Edwards et al. (2009)]<sup>4</sup> [Edwards et al. (2003b)]<sup>5</sup> [Goltrant et al. (1998)]<sup>6</sup> [Renault et al. (2010)]<sup>7</sup> [Bailat et al. (2000)]<sup>8</sup> [Renault et al. (2011)]<sup>9</sup> [Renault et al. (2009)]<sup>10</sup>, ORR : Oak Ridge Research Reactor (RNR), HFIR : High Flux Isotope Reactor (RNR).



La densité et la taille des boucles de Frank sur différents plans de glissement dans un même grain d'un acier 304 E irradié à 21.6 dpa dans un REP sont montrées dans le **Tableau 1.9**. Leur distribution est similaire (**Figure 1.24**).

Plans de glissement	(111)	(-111)	(1-11)	(11-1)	{111}
Densité ( $10^{22} \text{ m}^{-3}$ )	2.41	2.19	-	2.59	2.38
Taille (nm)	6.59	6.36	-	7.70	9.80

Tableau 1.9 : Densité et tailles de boucles de Frank observées sur différents plans de glissement dans le même grain d'un acier 304 E [Renault et al. (2010)].

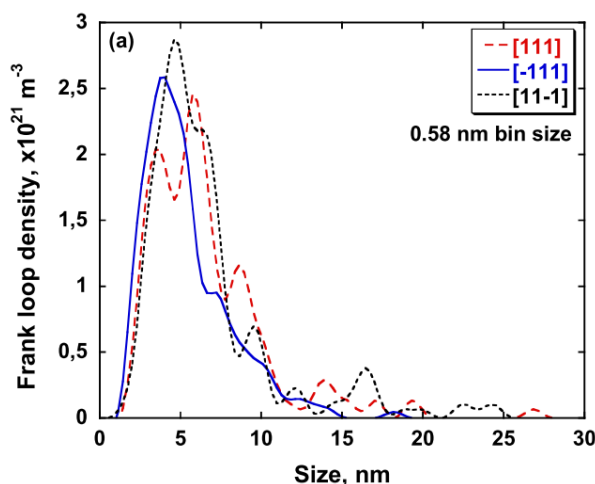


Figure 1.24 : Distribution de la densité de boucles de Frank en fonction de leur taille pour différents plans de glissement dans le même grain d'un acier 304 E [Renault et al. (2010)].

### 1.2.3.3 Formation de bulles de gaz et de cavités

On s'intéresse ici à la formation et à l'évolution des cavités vides et des bulles de gaz, dans les aciers inoxydables austénitiques utilisés comme matériaux des internes de cuve dans les REP. L'effet de ces bulles et cavités sur les propriétés mécaniques est un des objectifs de cette étude. Ces deux types de défauts volumiques dus à l'irradiation peuvent conduire à un phénomène de gonflement macroscopique des composants de structure, après une irradiation neutronique à forte dose. Le gradient de gonflement provoque une possibilité de distorsion dans ces composants [Dubuisson (2011)], ce qui fait un lien avec les phénomènes de l'IASCC et du fluage par irradiation.

Outre de la composition chimique elle-même, la formation des cavités et des bulles de gaz dépend fortement de la température, et aussi du type de réacteur (fluence, spectre, etc.). Dans un réacteur REP, les neutrons épithermiques (neutrons situés dans la gamme d'énergie de 10eV à 20keV environ et ayant une vitesse supérieure à celle des neutrons thermiques) et thermiques conduisent à la production des gaz d'hydrogène et d'hélium. L'origine principale de la production d'hélium dans les aciers inoxydables austénitiques est par une chaîne de transmutations du Nickel :  $^{58}\text{Ni} + n \rightarrow ^{59}\text{Ni} + \gamma$ , et puis  $^{59}\text{Ni} + n \rightarrow ^{56}\text{Fe} + {}^4_2\text{He}$  ( $\sim 15 \text{ appm}^1/\text{dpa}$ ), et aussi par une réaction de transmutation du Bore (un élément d'ajout très mineur dans le matériau) :  $^{10}\text{B} + n \rightarrow ^7\text{Li} + {}^4_2\text{He}$  (au maximum  $20 \text{ appm}$  au total). Ainsi, dans les REP, l'irradiation produit beaucoup plus de gaz que dans les RNR, dont le

<sup>1</sup> appm : atomic parts per million

spectre est représenté par les neutrons à haute énergie (neutrons rapides). Sur la **Figure 1.25**, on présente le domaine d'existence de cavités vides et de bulles de gaz en fonction de la fluence et de la température, pour les aciers inoxydables austénitiques, selon les données présentées dans la littérature. Cependant, compte tenu de l'effet de spectre, ces résultats ne sont pas forcément transposables au REP.

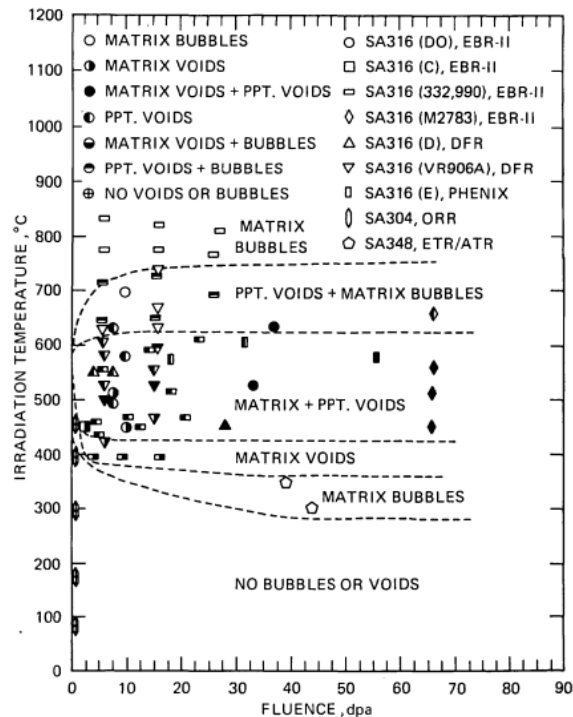


Figure 1.25 : Domaine d'existence de cavités vides et de bulles de gaz, en fonction de la fluence et de la température, pour les aciers inoxydables austénitiques [Maziasz et Mc Hargue (1987), Maziasz (1993) et Zinkle et al. (1993)].

A une température relativement basse (<280°C), aucune cavité vide ni aucune bulle de gaz ne sont observées (ou mentionnées) dans les références étudiées ici [Edwards et al. (2003a)]. En fait, à basse température, la mobilité des lacunes et des interstitiels est relativement faible. Un équilibre dynamique entre les défauts interstitiels et les défauts lacunaires est construit. Les défauts interstitiels sont des boucles de dislocations, et les défauts lacunaires sont des "black dots" [Zinkle et al (1993)]. Ces "black dots" restent stables pour une température inférieure à environ 300°C. Ce phénomène permet d'empêcher la germination des bulles de gaz.

A partir d'une température proche de 300°C, l'instabilité des "black dots" s'amorce, tandis que les boucles de Frank restent stables jusqu'à une température d'environ 500°C. Dans cette gamme de température, le réseau initial de dislocations et les boucles de Frank présentent un biais d'absorption des défauts ponctuels de type interstitiel. En plus, la diffusion des lacunes devient plus facile, ce qui augmente la possibilité de rencontrer d'autres lacunes et des atomes d'hélium. Les atomes d'hélium jouent un rôle important comme catalyseur pour le regroupement de lacunes qui migrent par diffusion dans le matériau, ce qui est considéré comme une source de germination des cavités. La formation de cavités vides est en général favorisée par la présence d'hélium. En général, le phénomène de gonflement dépend des paramètres d'irradiation, tels que la température, le flux de neutrons et la quantité de gaz créée au cours de l'irradiation [Dubuisson (2011)].

La majorité de l'hélium produit par transmutation reste dans la matrice et une faible quantité est stockée dans les bulles de gaz [Odette et Lucas (1989) et Johnston et al. (2001)]. A ce jour, la concentration d'hélium peut déjà être relativement précisément mesurée et prédite grâce à la maîtrise de la connaissance du spectre neutronique, de l'histoire d'irradiation, et de la composition chimique de l'acier [Garner et al. (2001)]. En plus, au cours de l'irradiation, d'autres gaz sont aussi créés (hydrogène) [Maziasz (1993)]. La source d'hydrogène est principalement par la transmutation ( $n, p$ ), mais aussi par un environnement d'irradiation combinée à la présence d'eau (milieu primaire pour les REP). Une fois qu'un certain volume de bulles de gaz est atteint, l'hydrogène produit par ces sources peut ensuite être stocké. Dans les aciers inoxydables austénitiques, la teneur maximale d'hydrogène en conditions de REP est environ 400-600appm [Garner et Greenwood (2003) et Garner et al. (2006)], qui respecte la loi de Sieverts [Erwin et Kerr (1982)]. Cependant, une grande quantité d'hydrogène au-delà de cette quantité estimée peut être mesurée sous différentes conditions d'irradiation [Edwards et al. (2003b), Fujimoto et al. (2005) et Garner et al. (2006)]. Dans ces cas-là, l'hydrogène est plus susceptible d'être stocké à l'intérieur de bulles de gaz, que sur la surface de cavités ou dans le réseau cristallin. Plus mobile que l'hélium, la mesure de la quantité d'hydrogène est très sensible à la température d'irradiation, au taux de dose, et aussi à la microstructure due à l'irradiation [Jacobs (1987) et Garner et al. (2001)].

Un moyen pour distinguer les cavités vides et les bulles de gaz est d'observer au MET la forme de cavités. En raison de la pression interne qui peut atteindre jusqu'à 10 000atm, les bulles de gaz sont "purement" sphériques. Par contre, les cavités vides sont légèrement facettées (**Figure 1.26** et **Figure 1.27**), notamment suivant les plans de glissement de type {111}. En position intragranulaire, les cavités observées présentent préférentiellement une distribution uniforme, et se trouvent éventuellement à l'interface de certains précipités [Maziasz et Mc Hargue (1987)]. Si la diffusion des gaz est suffisante, on peut trouver les bulles de gaz aux joints de grains, ou sur les dislocations, avec une densité plus élevée que celles dans le réseau cristallin (**Figure 1.28**). La formation de nano-cavités au bord des joints de grains provoque une sensibilité à la rupture intergranulaire et à la corrosion sous contrainte intergranulaire (IGSCC) (**Figure 1.28(b)** et **Figure 1.29**) [Bruemmer et al. (1999)]. On remarque ici que le matériau observé sur les **Figure 1.26(a)** et **Figure 1.28** est issu des tubes d'instrumentation (tubes RIC) et celui sur la **Figure 1.26(b)** est issu d'une vis, situées au cœur du réacteur Tihange 1, où le flux est assez important.

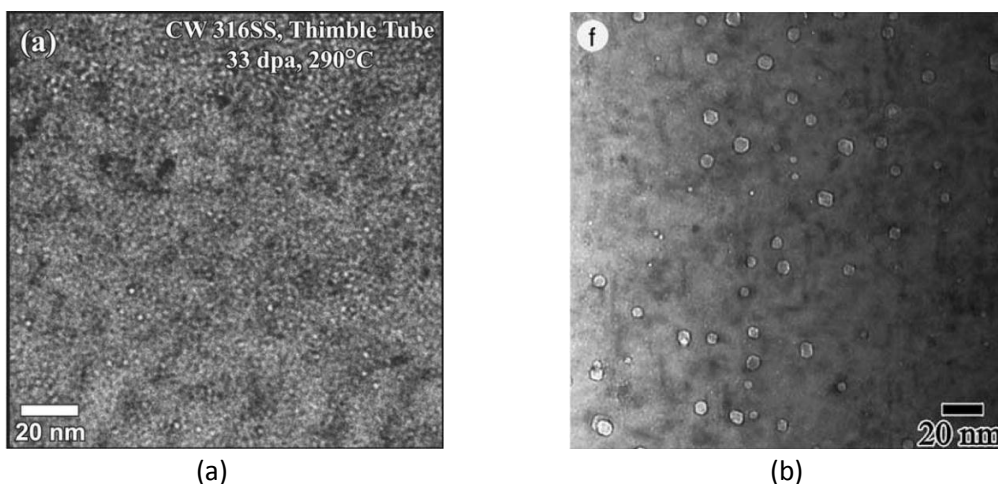


Figure 1.26 : Observations en MET des cavités formées dans l'acier 316 E, tube d'instrumentation irradié en REP, (a) nano-bulles de gaz, à 33dpa, 290°C [Edwards et al. (2009)]; (b) cavités vides, à 7.5dpa, 330°C [Edwards et al. (2003b)].

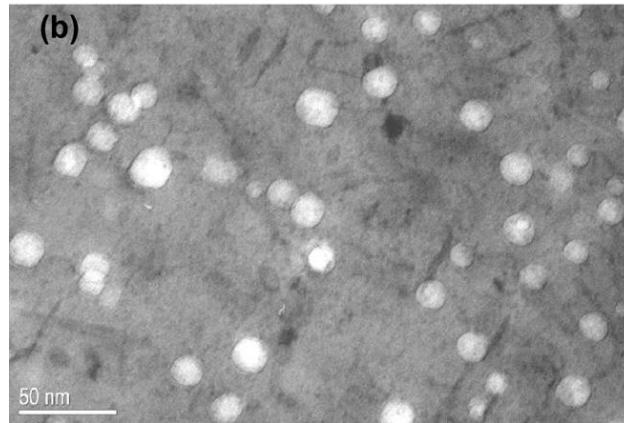


Figure 1.27 : Observations en MET des cavités formées dans l'acier 304L Hyp, irradié à 36dpa à 390°C dans le réacteur PHENIX, [Renault et al. (2011)].

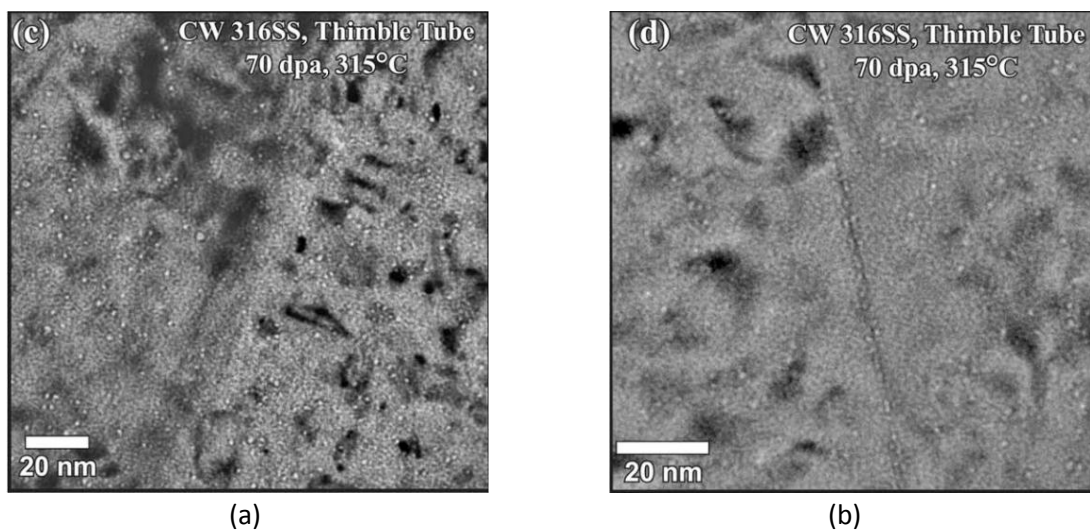


Figure 1.28 : Observations en MET des cavités formées dans l'acier 316 E, tube d'instrumentation irradié en REP, à 70dpa, pour une température de 315°C, (a) cavités en position intragranulaire; (b) "bubble-like" cavités aux joints de grains [Edwards et al. (2009)].

La taille moyenne des bulles de gaz est assez faible, souvent inférieure à 3nm. Elles peuvent croître soit par regroupement de lacunes et d'atomes de gaz, soit par coalescence entre elles. En général, la formation de cavités vides est favorisée par la présence d'hélium. Les bulles de gaz ultrafines germées empêchent la formation des cavités vides à une température relativement basse (~300°C). Après la germination des bulles de gaz, pour une température plus élevée, elles croissent jusqu'à un diamètre critique. Au-delà de ce diamètre, ces bulles de gaz peuvent se transformer en cavités vides, et croître par l'absorption de lacunes en sursaturation créée par l'irradiation, sans avoir besoin d'être stabilisées par une pression interne de gaz [Maziasz (1993)]. Edwards a noté l'existence d'un pic pour la densité des cavités observées qui correspond à une taille d'environ 3-4nm. Ceci est probablement dû à la transformation de bulles de gaz en cavités vides [Edwards et al. (2003b)] (**Figure 1.30**). Le diamètre critique de la transformation de bulles de gaz stables en cavités vides augmente avec la teneur d'hélium dans les aciers inoxydables austénitiques [Pedraza et Maziasz (1987) et Foster et al. (1995)].

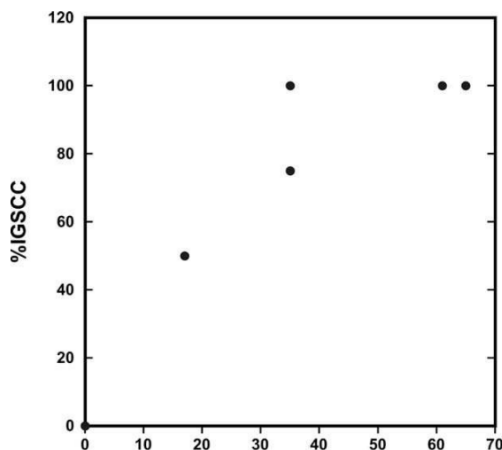


Figure 1.29 : Taux de l'IGSCC mesuré en fonction de la dose (en dpa), pour un acier 316 écroui [Fujimoto et al. (2005)].

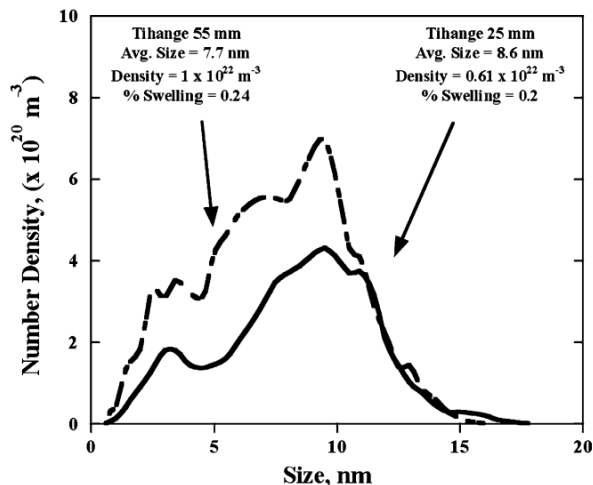


Figure 1.30 : Densité des cavités observées en fonction de leur taille, pour deux conditions d'irradiation : à 12.2dpa, 343°C en trait plein et à 7.5dpa, 333°C en pointillés, sur une vis de REP [Edwards et al. (2003b)].

On synthétise dans le **Tableau 1.10** des données de la littérature sur les cavités dans les aciers inoxydables austénitiques de type 304 et 316 dans diverses références de la littérature.

Matériau	Conditions d'irradiation	Densité (m <sup>-3</sup> )	Taille (nm)	Teneur d'hélium (appm)	Teneur d'hydrogène (appm)	Gonflement macroscopique (%)
316 E <sup>1</sup>	PWR, 7.5dpa, 333°C	1.0 10 <sup>22</sup>	7.7	48.8	1840, 3740	0.24
	PWR, 12.2dpa, 343°C	6.1 10 <sup>21</sup>	8.6	52.7	720, 1260, 3660, 3710	0.2
	PWR, 19.5dpa, 320°C	<10 <sup>20</sup>	<2	71	493, 743	<0.01
316 E <sup>2</sup>	PWR, 33dpa, 290°C	6.1 10 <sup>22</sup>	-	-	-	-
	PWR, 70dpa, 315°C	1.6 10 <sup>23</sup>	<3	-	-	<0.2
304 Hyp <sup>3</sup>	PWR, 9dpa, 310°C	0.93 10 <sup>21</sup>	6.0	-	-	0.01
304 Hyp <sup>4</sup>	PWR, ~35dpa, ~310°C	1.0 10 <sup>21</sup>	1.0	-	-	<0.01
316 E <sup>5</sup>	PWR, ~35dpa, ~300°C	6.0 10 <sup>23</sup>	1.0	-	-	0.03
316 E <sup>6</sup>	PWR, 12dpa, 360°C	2.3 10 <sup>21</sup>	10	-	-	0.12
304 Hyp <sup>7</sup>	EBR-II, 10dpa, 375°C	4.7 10 <sup>21</sup>	5.4	-	-	0.04
316 E <sup>7</sup>		quelques	4.6	-	-	-
304 E <sup>7</sup>	EBR-II, 8.9dpa, 375°C	7.8 10 <sup>21</sup>	10.8	-	-	0.7
304 Hyp <sup>8</sup>	EBR-II, 4.8dpa, 371°C	4.3 10 <sup>20</sup>	24	-	-	0.325
	EBR-II, 15dpa, 371°C	4.6 10 <sup>20</sup>	30	-	-	0.65
304L Hyp <sup>9</sup>	PHENIX, 11dpa, 380°C	3.5 10 <sup>21</sup>	8.3	-	-	0.11
	PHENIX, 36dpa, 390°C	6.1 10 <sup>21</sup>	13	-	-	0.7

Tableau 1.10 : Densités et tailles de cavités, teneurs d'hélium et d'hydrogène, et taux de gonflement, dans les aciers inoxydables austénitiques de type 304 et 316, sous différentes conditions d'irradiation neutronique [Edwards et al. (2003b)]<sup>1</sup> [Edwards et al. (2009)]<sup>2</sup> [Byrne et al. (2002)]<sup>3</sup> [Goltrant et al. (1998)]<sup>4</sup> [Foster et al. (1995)]<sup>5</sup> [Etienne et al. (2008)]<sup>6</sup> [Pokor et al. (2004c)]<sup>7</sup> [Allen et al. (2000)]<sup>8</sup> [Renault et al. (2010)]<sup>9</sup>.

Les données du **Tableau 1.10** montrent que la teneur de gaz, la densité et la taille des cavités dépendent fortement des conditions d'irradiation (spectre, température, dose, etc.). D'après Edwards [Edwards et al. (2003b)], dans un réacteur nucléaire, la région où le plus fort gonflement dû aux cavités vides est détecté est celle qui contient la quantité la plus élevée d'hydrogène. Les tailles de cavités dans les 304 Hyp et 316 E sont comparables, mais la densité de cavités dans le 304 Hyp est plus élevée que dans le 316 E, pour les mêmes conditions d'irradiation. Le taux de dose semble jouer un rôle important sur le gonflement [Dubuisson (2011)]. Un sommet du niveau de gonflement a été observé en fonction du taux de dose en RNR. Les cavités apparaissent plus tôt dans l'acier 304 Hyp que dans l'acier 316 E, par l'irradiation aux neutrons [Pokor et al. (2004b)] ou par l'irradiation aux protons avec une pré-injection d'hélium [Sencer et al. (2003)]. Le pré-écrouissage de l'acier inoxydable austénitique permet de retarder et de réduire le gonflement. Dans un matériau, la présence d'un grand nombre de dislocations limite la sursaturation lacunaire, ce qui permet de réduire la formation et la croissance de cavités. La teneur en éléments d'addition en solution solide est aussi un facteur très important qui influence l'effet du gonflement. Une augmentation de la teneur en Ni et une diminution de la teneur en Cr permettent d'augmenter efficacement la résistance au gonflement dans un environnement nucléaire (e.g. l'acier 15-15 Ti écroui) [Dubuisson (2011)]. L'utilisation des aciers ferritiques-martensitiques renforcés par des dispersions d'oxydes (en anglais : *ODS steel*) est également une orientation actuelle de recherche pour réduire l'effet du gonflement [Zhang et al. 2009 et Toloczko et al. 2004].

En conditions d'irradiation REP, une fragilisation due au gonflement (en anglais, *swelling-induced embrittlement*) au mode de rupture par quasi-clivage peut se produire pour un taux de gonflement égal ou supérieur à 10 % [Hamilton et al. (1987), Garner et al. (1993) et Foster et al. (1995)]. Pour un taux de gonflement d'environ 5-6%, une transition du mode de rupture apparaît, en passant de la rupture ductile à la rupture par quasi-clivage (ou « *Channel fracture* ») (**Figure 1.31**) [Dubuisson (2011)]. Le mécanisme de la fragilisation due au gonflement est très lié aux autres évolutions microstructurales à forte dose ou à très haute température : ségrégation, précipitation et instabilité de phase [Hamilton et al. (1987)]. Selon les études sur les RNR, un gonflement élevé (>10%) peut apparaître dans les aciers inoxydables austénitiques [Neustroev et Garner (2008) et Porollo et al. (2009)]. Par contre, pour les REP, le taux de gonflement extrapolé à une dose de 100dpa est toujours inférieur à 10%, selon les études sur les RNR (EBR-II et HFIR) [Foster et al. (1995) et Allen et al. (1999)]. Tous les facteurs (température, dose, taux de dose, production de gaz et microstructure, etc.) qui impactent le phénomène de gonflement, peuvent avoir des effets opposés et interconnectés, ce qui complique l'étude sur l'extrapolation de l'effet du gonflement en REP [Dubuisson (2011)].

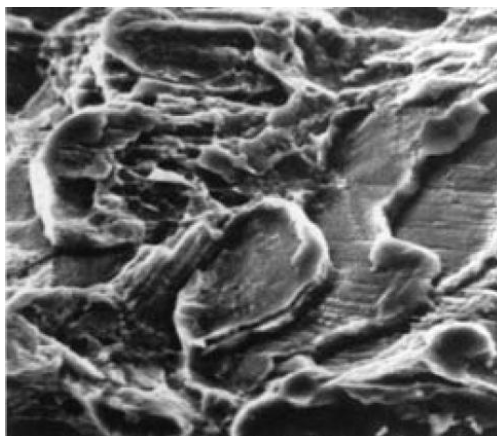


Figure 1.31 : Faciès de rupture d'un acier 316 Ti irradié à une température de 405°C dans le réacteur PHENIX (RNR), à une dose de 48dpa.

Par conséquent, le phénomène de la fragilisation due au gonflement n'apparaît probablement pas dans les structures internes de cuve des REP, selon l'extrapolation basée sur les études en RNR. Cependant, des études plus directes et plus approfondies sont nécessaires pour explorer ce phénomène limitant la durée de fonctionnement du REP.

### 1.2.3.4 Ségrégation induite par irradiation

La ségrégation induite par irradiation (en anglais : *RIS, Radiation-Induced Segregation*) est un effet d'irradiation qui conduit à une redistribution des éléments de soluté et d'impureté dans le matériau. Ce phénomène se traduit par un enrichissement ou un appauvrissement des éléments d'alliage sur les puits : principalement les joints de grains, mais aussi les dislocations, les boucles de Frank, les cavités, les surfaces libres et les joints de phases. Sur la **Figure 1.32**, Renault [Renault et al. (2009)] a présenté les profils de composition chimique de deux grains dans les aciers 304 Hyp, irradiés respectivement à 60dpa et à 95dpa, pour une température de 330°C. Une cohérence globale a été observée dans tous les grains étudiés. On observe un enrichissement en nickel et en silicium, et un appauvrissement de fer et de chrome aux joints de grains. Une observation similaire a été trouvée dans le travail d'Edwards [Edwards et al. (2003b)]. La RIS augmente fortement entre 0dpa et 10-20dpa avant d'atteindre une stabilisation.

Le phénomène de RIS peut être expliqué par deux principaux mécanismes, qui sont reportés sur la **Figure 1.33** :

- **Ségrégation par l'effet Kirkendall inverse** : En raison de coefficients de diffusion différents des solutés parmi les Fe, Cr et Ni, le chrome et le fer ayant une vitesse de diffusion plus élevée vont s'appauvrir au voisinage des puits afin d'équilibrer la migration des lacunes vers les puits. Le nickel ayant la vitesse de diffusion la plus faible ségrège sur ces puits.
- **Ségrégation par l'association interstitielle** : Les auto-interstitiels traînent les éléments à rapport de taille négatif (Si, P), et diffusent vers les puits.

Edwards [Edwards, 2003b] observe que le Ni s'enrichit sur les surfaces de cavités, tandis que le Fe et le Cr s'appauvrissent sur ces surfaces. La baisse de la teneur en Ni dans le réseau cristallin provoque une transformation de phases de l'austénite  $\gamma$  en martensite  $\epsilon$  lors de la déformation. Une rupture peut se produire au joint de grain entre ces deux phases, où le module de déchirement devient quasiment zéro, spécialement à une température relativement basse [Hamilton et al. (1987) et Foster et al. (1995)]. De plus, en utilisant une sonde atomique tomographique (SAT), on observe que les amas Ni-Si sont formés au niveau des boucles de Frank. La ségrégation du Mo et du P sur l'interface de ces boucles est aussi observée [Etienne et al. (2008)]. Selon Bruemmer, le seul effet de la RIS sur la possibilité de l'IASCC est dû à l'appauvrissement en Cr aux joints de grains dans les aciers inoxydables austénitiques. En plus, si le bore ségrège aux joints de grains, il est possible que l'hélium produit par la transmutation s'enrichisse au voisinage de joints de grains, ce qui provoque une fragilisation intergranulaire [Bruemmer et al. (1999)].

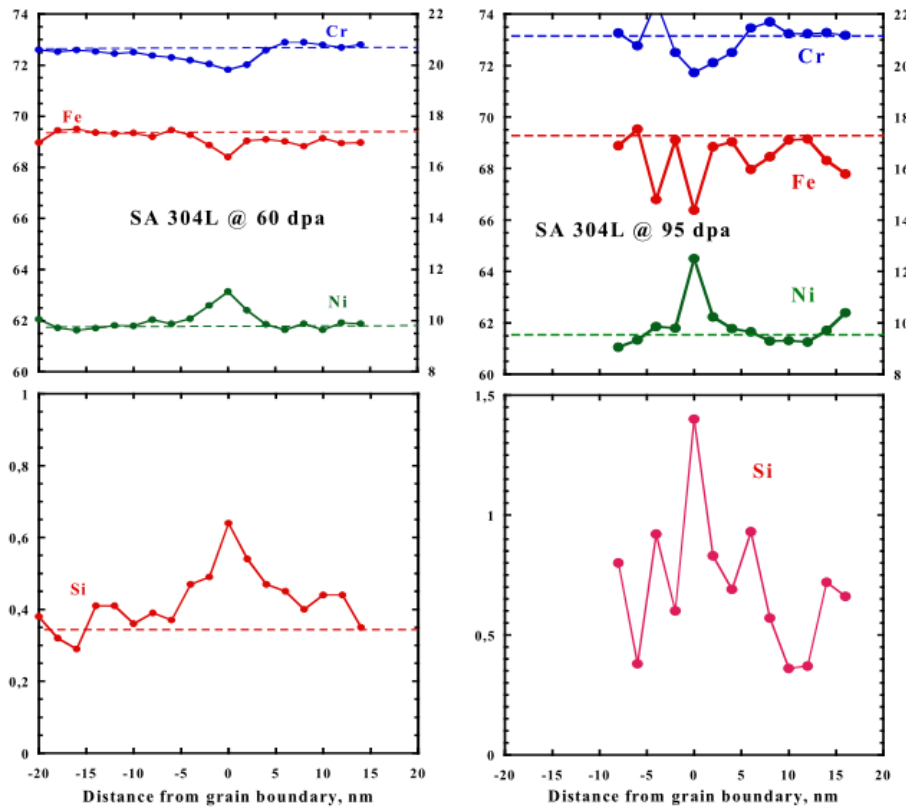


Figure 1.32 : Profils de ségrégation mesurés sur les joints de grains dans les matériaux 304 Hyp, irradiés à 60dpa et à 95dpa, à 330°C. Un enrichissement de Ni et Si et un appauvrissement de Fe et Cr aux joints de grains ont été observés [Renault et al. (2009)].

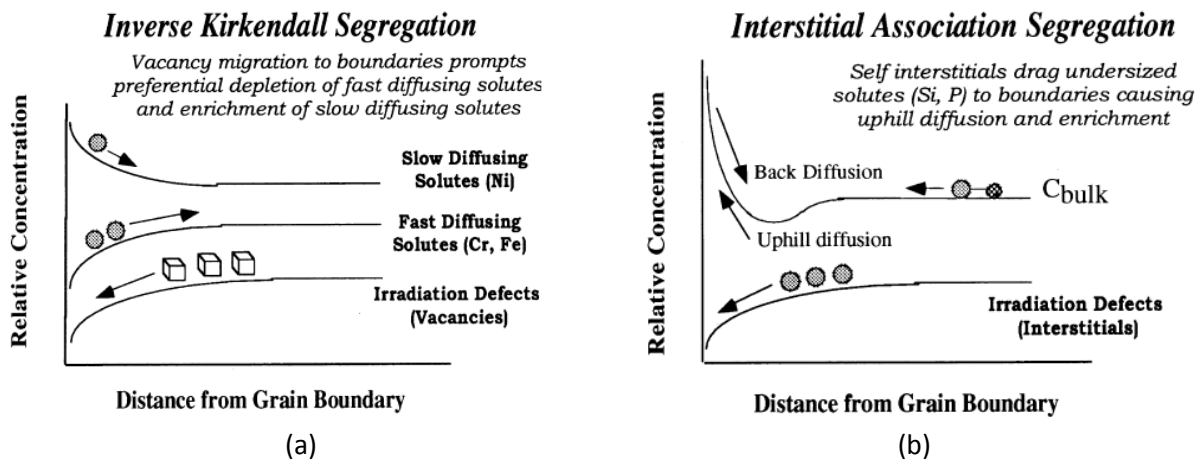


Figure 1.33 : (a) Le mécanisme de ségrégation par l’effet Kirkendall inverse, (b) le mécanisme de ségrégation par l’association interstitielle [Bruemmer et al. (1999)].

### 1.2.3.5 Précipitation sous irradiation

Aux températures rencontrées dans les internes des REP (280-380°C), il existe très peu de données de la littérature ouverte sur la précipitation sous irradiation. Des petits précipités avec une faible densité ont été observés, pour un acier 316 E, irradié dans un REP à 70dpa et à 315°C [Edwards et al. (2009)]. Cependant, ni leur phase ni leur type n’ont été identifiés. Une précipitation en seconde phase  $\gamma'$  ( $Ni_3Si$ ) a été identifiée dans le fût d’une vis en 316 E, irradié dans un REP, à [12.2dpa 343°C] et



à [19.5dpa 320°C] [Edwards et al. (2003b)]. La densité de précipités  $\gamma'$  est  $\sim 0.6 \cdot 10^{23} \text{m}^{-3}$ , avec une taille moyenne d'environ 3nm (en comparaison avec la densité de boucles de Frank  $0.85 \cdot 10^{23} \text{m}^{-3}$  avec une taille moyenne de 9.5nm). Ces précipités sont situés sur le réseau préexistant de dislocations. Une autre phase de précipité qui ne correspond à aucune phase connue a aussi été observée. Dans la littérature ouverte [Renault et al. (2010)], Renault a présenté une observation des précipités en position intergranulaire d'un acier 316E irradié à 21.6dpa et à environ 300°C, en conditions d'irradiation des REP (Chooz A). La taille et la forme de ces précipités observés aux joints de grain sont irrégulières. Les phases de précipité  $\tau (M_{23}X_6)$ ,  $\eta (M_6X)$ ,  $G (M_6Ni_{16}Si_7)$  et  $\gamma'$  ont été identifiées dans l'acier 304L Hyp irradié dans le réacteur PHENIX à 390°C. Ces deux familles de nano-précipité sont riches en Ni et Cr [Renault et al. (2011)]. De nombreux précipités ont aussi été trouvés à l'intérieur et à proximité des joints de grains. La taille et la forme de ces précipités observés aux joints de grain sont irrégulières. Cependant, l'influence de cette précipitation intergranulaire sur quelques fissures observées autour des joints de grain n'est pas claire dans cette étude.

La formation de la précipitation en seconde phase  $\gamma'$  est fortement liée à la ségrégation induite par irradiation du Ni et du Si. A forte dose d'irradiation, cette phase peut éliminer une grande partie du Ni et la plupart du Si du réseau cristallin. L'appauvrissement du Ni dans le réseau cristallin accélère le gonflement par cavités. La phase  $\gamma'$  observée dans l'acier 316 dépend beaucoup des conditions d'irradiation (type de réacteur, taux de dose, histoire de l'irradiation) [Brager et Garner (1983)].

### 1.2.3.6 Formation de bandes claires

Après avoir détaillé les principaux défauts microstructuraux formés au cours de l'irradiation à l'échelle nanométrique, on présente ici des modes de déformation à l'échelle micrométrique, sur les matériaux inoxydables austénitiques, après une déformation plastique post-irradiation. Les mécanismes de déformation dépendent fortement de la température d'essai, de la contrainte, de la vitesse de déformation et de la dose d'irradiation. Les principaux mécanismes de localisation de la déformation sont liés à la formation de macles et à la formation de canaux de dislocation. A différents niveaux de doses et de contraintes, la **Figure 1.34** reporte les domaines où on observe de différentes modes de déformation, dans les aciers de type 316, irradiés et testés à basse température (60-100°C).

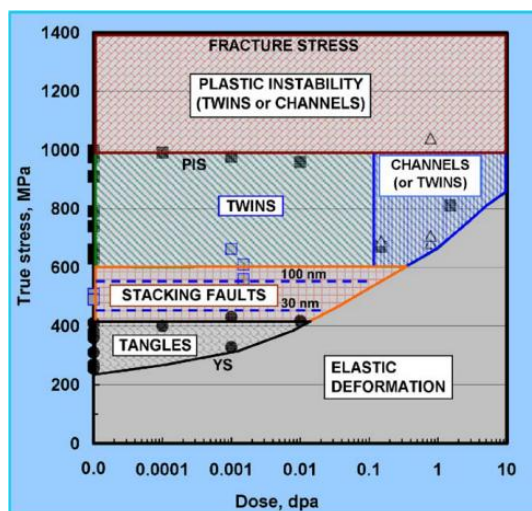


Figure 1.34 : Modes de déformation des aciers 316 et 316LN, en fonction de la contrainte rationnelle et de la dose. Les matériaux sont irradiés dans un HFIR (High Flux Isotope Reactor), à une température d'irradiation basse (60-100°C), et testés à une température ambiante [Byun et al. (2006)].

Selon différentes sources de la littérature [Cole et Bruemmer (1995), Bailat et al. (2000), Hashimoto et al. (2000), Victoria et al. (2000) et Byun et al. (2001)], pour une température d'irradiation relativement basse (<100°C), le mécanisme prédominant de localisation de la déformation dans les aciers inoxydables austénitiques est la formation de bandes de maclage. Pour ces températures, la cisssion résolue critique de maclage est largement atteinte en raison de l'augmentation de la limite d'élasticité due à l'irradiation. Lorsque la température d'irradiation augmente, les canaux de dislocation deviennent de plus en plus importants pour une localisation de la déformation [Lee et al. (2001b) et Lee et al. (2001c)], car la cisssion résolue critique de maclage devient difficile à atteindre quand l'énergie de faute d'empilement augmente avec la température. En l'occurrence, on parle d'une transition de mode de déformation. Dans les gammes de température de fonctionnement des REP (280-380°C), il semble que le mode de déformation soit lié à la vitesse de déformation. La déformation a lieu par canaux dans les aciers inoxydables austénitiques, à une faible vitesse de déformation (de l'ordre de  $10^{-6}s^{-1}$ ), avec très peu (ou aucune) macles observées [Cole et Bruemmer (1995), Hashimoto et al. (2000) et Victoria et al. (2000)]. A une vitesse de déformation moyenne (de l'ordre de  $10^{-4}s^{-1}$ ), le mode de déformation reste par canaux, mais avec une présence non négligeable de macles [Cole et Bruemmer (1995), Bailat (1999), Bailat et al. (2000), Hashimoto et al. (2000) et Nogaret (2007)] (**Figure 1.35** et **Figure 1.36**). D'après Bailat [Bailat et al. (2000)], pour une température de 277°C, le mode de déformation des aciers 304 et 316 à faibles doses est le maclage. Cependant, à 1.5dpa, les canaux sont observés dans l'acier 304, mais le model de déformation dans l'acier 316 est inchangée. La différence de mode de déformation entre les aciers 304 et 316 pourrait être une raison pour expliquer une sensibilité plus importante à l'IASCC pour l'acier 304 que pour l'acier 316.

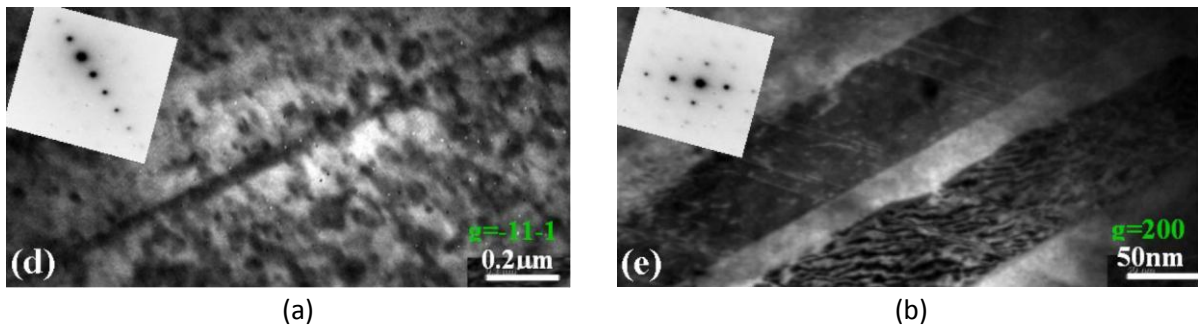


Figure 1.35 : Bandes de maclage observées dans l'acier 316, irradié et testé à 350°C, (a) macles observées sur la tranche; (b) bandes de maclage incliné qui permet de visualiser la microstructure interne de la macle [Nogaret (2007)].

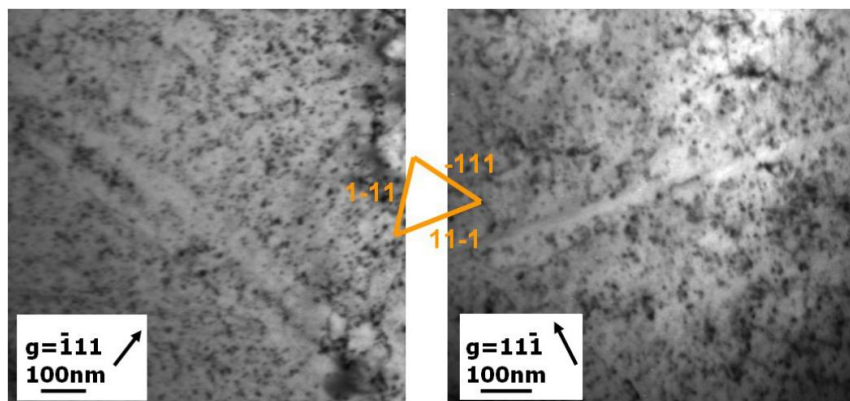


Figure 1.36 : Bandes claires formées par glissement de dislocations parfaites [Nogaret (2007)].

Bien que les bandes de maillage observées soient également libres de défauts d'irradiation, on parle de "bandes claires" spécifiquement pour désigner les canaux libres de défauts d'irradiation (ou avec une densité de défauts très réduite, selon les observations au MET *in-situ* dans [Pokor (2003)]), formés par glissement de dislocation parfaites, dont le passage fait disparaître les défauts créés au cours de l'irradiation. Les bandes claires constituent le principal mécanisme de localisation de la déformation aux températures de fonctionnement des REP dans les aciers inoxydables austénitiques. D'une manière générale, les bandes claires observées en MET possèdent une largeur de l'ordre de quelques dizaines de nanomètres jusqu'à une centaine de nanomètres, et une hauteur de l'ordre de quelques dizaines de nanomètres pour les aciers inoxydables austénitiques. L'annihilation progressive des boucles de Frank dans des bandes claires suite à un glissement des dislocations conduit à un adoucissement local dans les grains déformés et ainsi à la création d'une zone de passage préférentielle pour le glissement des dislocations suivantes. Pokor [Pokor (2003)] a observé lors d'une expérience de traction *in-situ* sur un acier 304 Hyp irradié aux ions, qu'au-delà d'une certaine contrainte seuil, la formation de bandes claires est certainement due au passage d'un grand nombre de dislocations mobiles, qui conduit à la disparition des boucles de Frank induites par irradiation. Puis les dislocations se déplacent uniquement dans ces bandes au sein d'un grain lorsque la contrainte augmente (**Figure 1.37**) ; le reste du grain ne se déformant pas plastiquement, sauf par apparition de nouveaux canaux.

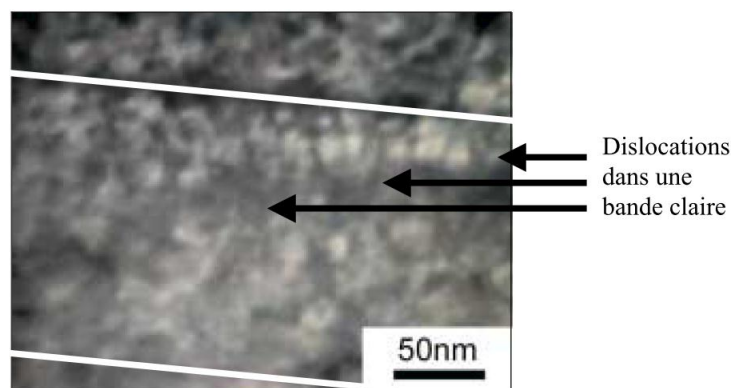


Figure 1.37 : Déplacement des dislocations mobiles dans les bandes claires formées lors d'une déformation plastique [Pokor (2003)].

Selon Edwards [Edwards et al. (2005)], les dislocations issues de sources de Frank-Read sont fortement décorées et ancrées par la microstructure créée par irradiation. Par conséquent, les dislocations plus glissiles sont issues de sites de concentration de contraintes/déformations, tels que des joints de grains, des interfaces, et des sites d'amorçage de fissures [Robach (2003), Robach et al. (2003) et Edwards et al. (2005)]. Une fois que ces dislocations ont été créées, elles peuvent glisser très rapidement selon les plans de glissement appropriés, et "effacer" les défauts d'irradiation sur ces plans. Selon Lee [Lee et al. (2001a)], les boucles de Frank créées au cours de l'irradiation dans l'acier 316LN interagissent avec l'empilement de dislocations, et se défont pour transformer en boucles parfaites. Ces dernières sont balayées par le glissement des dislocations. Sur la **Figure 1.38**, on montre les bandes claires formées par le passage des dislocations issues d'une pointe de fissure. Les bandes claires se propagent avec une vitesse de propagation très élevée à travers tout le grain jusqu'à ce qu'elles rencontrent des obstacles (interfaces, joints de grains, d'autres bandes, etc.). Le passage ultérieur des dislocations dans les bandes claires peut provoquer surtout un empilement de dislocations aux joints de grains. Cela conduit à une concentration de contraintes aux joints de grains, qui peut être une source de la rupture intergranulaire [Sauzay et al. (2010)]. Dans certaines conditions, les bandes claires peuvent même traverser les joints de grains ou de macles.

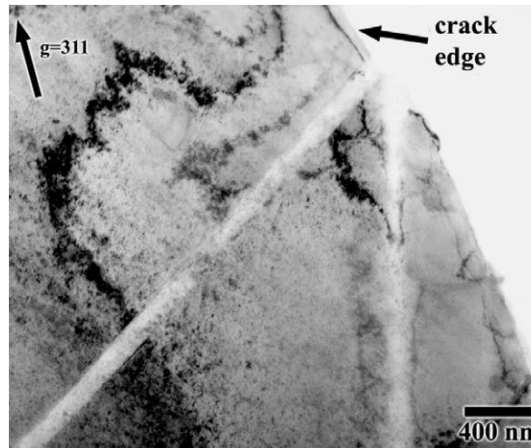


Figure 1.38 : Bandes claires formées au bord d'une fissure [Robach (2003)].

### 1.2.4 Bilan – effet d'irradiation sur les aciers inoxydables austénitiques

En conditions REP, les aciers inoxydables austénitiques montrent une évolution microstructurale due à l'irradiation neutronique, ce qui peut se traduire par une restauration du réseau initial de dislocations, une formation de défauts d'irradiation ("black dots", boucles de Frank, bulles de gaz, cavités vides, et éventuellement les précipités intergranulaires et intragranulaires), une ségrégation sur les puits, ainsi qu'une formation des bandes claires au cours de la déformation plastique. D'après cette recherche bibliographique, les conclusions suivantes peuvent être tirées : la microstructure de boucles de Frank est peu sensible aux conditions d'irradiation (densité à l'ordre de grandeur de  $10^{22} \text{m}^{-3}$ ), à l'exception de la température d'irradiation. La densité de boucles de Frank augmente avec la dose et tend vers une saturation à 5-10dpa. Au contraire, la population de cavités montre une grande dépendance avec le spectre du réacteur, la température et la dose d'irradiation. Le phénomène de la fragilisation due au gonflement n'apparaît probablement pas dans les structures internes de cuve des REP, selon l'extrapolation basée sur les études en RNR. Cependant, des expériences en conditions REP sont nécessaires pour explorer ce phénomène qui limitant éventuellement la durée de fonctionnement du réacteur.

Les boucles de Frank jouent un rôle important dans le durcissement et le fluage par irradiation des matériaux. Au cours de la déformation plastique, les bandes claires libres de boucles de Frank ont été observées. La formation des canaux est considérée comme principale mécanisme de localisation de la déformation, ce qui conduit à un adoucissement à l'échelle macroscopique. La ségrégation aux joints de grains et les bandes claires contribuent à la susceptibilité à l'IASCC et provoquent une perte de ténacité. La formation de bulles de gaz et de cavités vides peut conduire à un gonflement macroscopique. Cependant, les données dans la littérature ouverte en conditions REP à fortes doses ne sont pas assez nombreuses. Une modélisation qualitative (voire quantitative) est donc une étape incontournable pour prédire le comportement mécanique des aciers inoxydables austénitiques irradiés à fortes doses, pour assurer le fonctionnement des REP et contribuer à la prolongation de leur durée de fonctionnement.

## 1.3 Mécanismes de déformation dans les aciers inoxydables austénitiques fortement irradiés

Comme présenté dans la dernière section, au cours de l'irradiation neutronique, l'évolution microstructurale des matériaux irradiés conduit à une modification macroscopique du comportement mécanique lors de la déformation, qui se traduit surtout par un durcissement suivi par un adoucissement sur la courbe de traction, pour les matériaux irradiés à fortes doses (e.g. **Figure 1.12**). Cette évolution microstructurale montre une tendance à la saturation autour de 10dpa pour les aciers inoxydables austénitiques. Nous présentons progressivement dans cette section deux modèles à bases physiques permettant de décrire les mécanismes de durcissement et d'adoucissement par irradiation.

### 1.3.1 Modèle de durcissement par barrières dispersées et d'adoucissement par canalisation

Le modèle de durcissement par barrières dispersées (en anglais : *Dispersed Barrier Hardening Model*) est le modèle le plus souvent utilisé pour décrire le durcissement induit par irradiation des matériaux métalliques. Une belle synthèse a été faite dans la thèse d'Onimus [Onimus (2003)]. En considérant que les défauts d'irradiation immobiles (principalement les boucles de Frank dans les aciers inoxydables austénitiques) agissent comme obstacles aux dislocations mobiles, de plus, ces boucles sont uniformément distribuées dans le matériau, selon les études dans la littérature [Friedel (1964), Kelly et Nicholson (1971), Adda et al. (1991), Estrin (1996), Onimus (2003) et Pokor (2003)], il faut appliquer une tension de ligne suffisante pour qu'une dislocation mobile puisse franchir les obstacles (**Figure 1.39**). L'expression du durcissement par les boucles de Frank peut s'écrire par :

$$\Delta\sigma = \frac{\alpha M \mu b}{l}, \text{ avec } l = (Nd)^{\frac{1}{2}}$$

avec  $l$  la distance moyenne entre boucles de Frank,  $\alpha$  la force d'obstacles effective des boucles de Frank,  $M$  le facteur de Taylor,  $\mu$  le module de cisaillement,  $b$  le vecteur de Burgers,  $N$  la densité volumique des boucles de Frank, et  $d$  la taille des boucles de Frank. On note que la force d'obstacles des boucles de Frank présente un effet durcissant moyen entre 0.2 et 0.5, synthétisée dans la thèse de Pokor [Pokor (2003)] issues de différentes littératures.

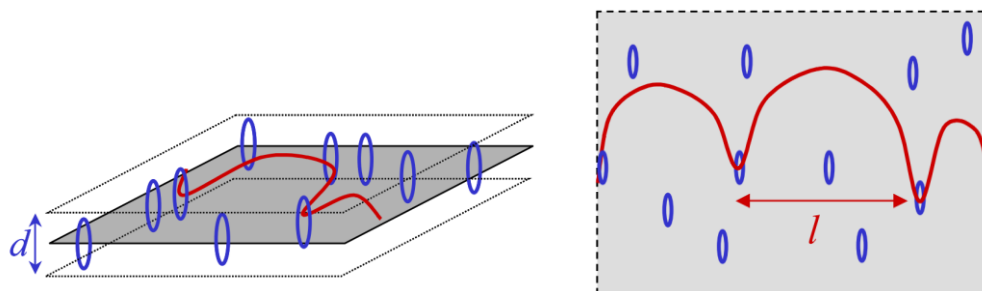


Figure 1.39 : Ancre d'une ligne de dislocation par les boucles coupant son plan de glissement [Onimus (2003)].

Ce modèle de durcissement suggère que les défauts d'irradiation agissent comme des obstacles rigides et indestructibles (durcissement de type Orowan). Cette hypothèse n'est pas réaliste, car l'annihilation des boucles de Frank et la formation des canaux (bandes claires) ont été constatées suite à une déformation plastique d'un acier inoxydable austénitique irradié (**Section 1.2.3.6**). Ici, on distingue les interactions « *in-plane* » et « hors plan » entre dislocations et boucles de Frank. Rodney [Rodney (2000) et Pokor (2003)] a réalisé les simulations en statique moléculaire à 0K de l'interaction entre une dislocation et une boucle de Frank dans le nickel. Dans le cas où la dislocation et la boucle de Frank se situent dans le même plan de glissement de type {111}, l'application d'une contrainte entraîne ici une interaction « *in-plane* » entre eux qui conduit à un défautement de la boucle de Frank qui se transforme en boucle parfaite. Par contre, dans le cas où la dislocation et la boucle de Frank se situe dans des plans de glissement différents, l'application d'une contrainte n'entraîne pas de défautement de la boucle. La dislocation peut traverser la boucle de Frank en créant une marche sur la boucle. Des travaux de Yang par les simulations de dynamique moléculaire [Yang et al. (2003)] ont confirmé ces deux types d'interactions présentées ci-dessus. Il a montré que dans ces deux cas, les boucles de Frank ne peuvent pas devenir des boucles prismatiques. Le défautement d'une boucle de Frank est suivi par l'incorporation de cette boucle parfaite dans la ligne de dislocation mobile. Ainsi, les boucles de Frank peuvent être sources des dislocations lors d'une déformation plastique. Ce mécanisme d'annihilation des boucles de Frank de type interstitiel « *in-plane* » peut s'écrire par :  $\frac{a}{3}[111] + \frac{a}{6}[2\bar{1}\bar{1}] + \frac{a}{6}[\bar{1}2\bar{1}] \rightarrow \frac{a}{2}[110]$ . Les résultats ci-dessus ont également été observés dans les travaux de Nogaret [Nogaret (2007)] réalisés par la DDD et la DM, qui a étudié en particulier les interactions entre les différents types de dislocations (vis, coin et mixte) et les différents types de défauts d'irradiation (boucles de Frank et tétraèdres de fautes d'empilement).

### 1.3.2 Modèle par blocage des sources induites par les cascades

Le modèle de durcissement par blocage des sources induites par les cascades (en anglais : *Cascade Induced Source Hardening Model*) est un modèle proposé par Trinkaus et Singh [Trinkaus et al. (1997a), Singh et al. (1997) et Trinkaus et al. (1997b)]. Blewitt [Blewitt et al. (1960)] a envisagé que le mécanisme de durcissement par irradiation n'est pas de type Orowan, puisque les défauts d'irradiation n'agissent pas comme des obstacles rigides et indestructibles, mais est conduit par l'ancrage des dislocations par les amas de défauts ponctuels sous forme de petites boucles glissiles créées par les cascades, à la manière des atmosphères de Cottrell, qui devient des sources de Frank-Read. Ces boucles de type interstitiel peuvent glisser uni-dimensionnellement et être piégées par les champs de contraintes des dislocations si la distance entre les boucles et la dislocation est inférieure à une distance critique de « stand-off », en formant un nuage de défauts qui ancrent les dislocations décorées. Dans le cas où les dislocations sont fortement décorées (avec une forte dose), l'application d'une contrainte critique va conduire à l'activation de sources de Frank-Read à partir de ces dislocations ou d'autres entités microstructurales, pour amorcer la déformation plastique et interagir avec d'autres défauts d'irradiation (**Figure 1.40**). Dans le cas de faible dose (*i.e.* une faible densité d'amas ponctuels) ou d'une densité de dislocations forte (matériau écroui), on peut imaginer que la contrainte critique pour désancrer les dislocations soit atteinte avant celle nécessaire pour activer des sources Frank-Read. On appelle dans ce texte, l'un ou l'autre des mécanismes, « effet d'avalanche » pour décrire le processus de désancrage des dislocations. La cission critique nécessaire pour débloquent les dislocations peut s'exprimer comme :

$$\tau \approx 0.1\mu(b/l)(d/y)^2$$

avec  $l$  l'espace moyen entre deux boucles,  $\mu$  le module de cisaillement,  $b$  le vecteur de Burgers,  $y$  la distance de « stand-off », et  $d$  le diamètre des boucles.

Ce modèle est principalement soutenu par la simulation numérique (par la dynamique moléculaire, etc) [Trinkaus (1997b), Rodney (1999), Osetsky et al. (2000), Rodney et al. (2001) et Huang et Ghoniem (2002)]. Cependant, peu d'études expérimentales permettent de justifier ce mécanisme. La **Figure 1.41** montre une dislocation située dans un nuage de boucles interstitielles, dans un cuivre irradié aux neutrons, observée en TEM *ex-situ* [Makin (1964)]. Il n'est pas clair que les petites boucles sont en train de glisser vers la dislocation pour l'ancrer ou d'être balayées par cette dislocation car les densités des boucles entre les deux côtés de cette dislocation sont très différentes. A ce jour, aucune étude spécifique n'a été trouvée concernant les aciers inoxydables austénitiques.

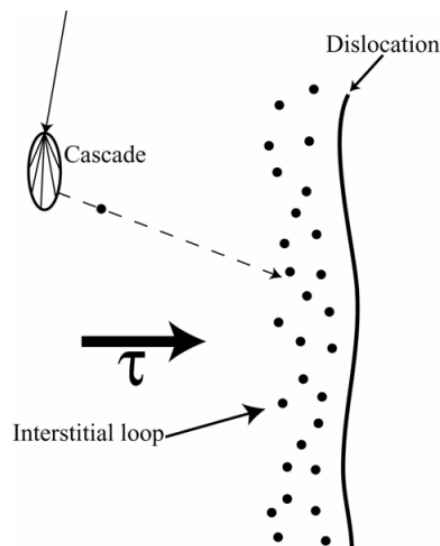


Figure 1.40 : Principe de mécanisme de durcissement par blocages des sources induites par les cascades [Robach (2003)].

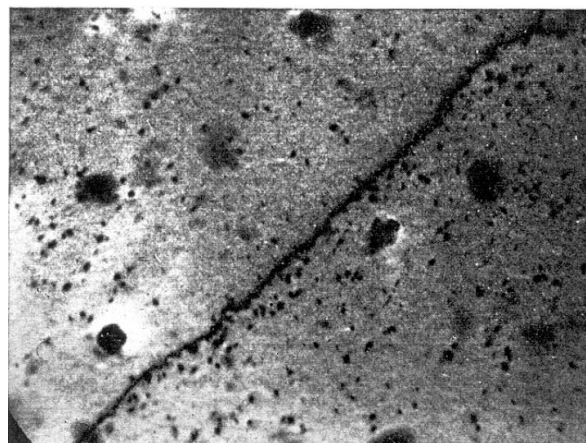


Figure 1.41 : Une dislocation située dans un nuage de boucles interstitielles, dans un cuivre irradié aux neutrons, observée en TEM *ex-situ* [Makin (1964)].

## 1.4 Modèles monocristallins pour une structure CFC

### 1.4.1 A propos de l'échelle monocristalline

La **Figure 1.42** présente différents types de simulation du comportement plastique avec les transitions entre les différentes échelles. On découvre que l'échelle monocristalline se trouve au centre de cette approche. Un monocristal est un domaine du matériel qui possède une orientation cristallographique. Il peut servir à fournir une modélisation sur un VER (Volume Élémentaire Représentatif) en tenant compte des paramètres caractéristiques (texture, fraction volumique des phases, morphologie, etc.). Son comportement se déduit des interactions entre les dislocations, qui par ailleurs, sont principalement étudiées et caractérisées par les méthodes de DDD (Dynamique des Dislocations Discrètes) et de DM (Dynamique Moléculaire).

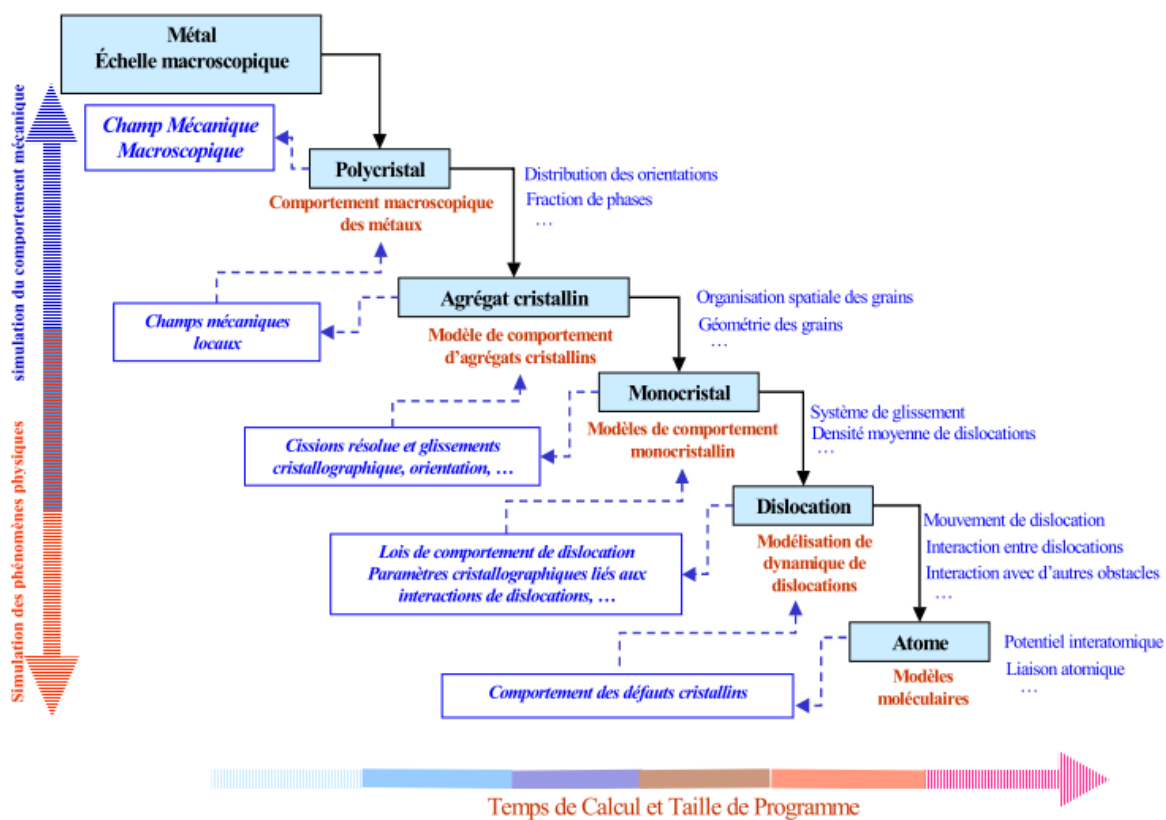


Figure 1.42 : Etudes de comportement plastique sur les différentes échelles disponibles [Saai (2007)].

### 1.4.2 Quelques notions élémentaires

- **Structure Cubique à Faces Centrées (CFC) :** les aciers inoxydables austénitiques présentent une structure Cubique à Faces Centrées (CFC) : 8 nœuds aux sommets du cube et 6 nœuds au centre de chacune des faces de ce cube. Le glissement s'effectue sur les plans cristallographiques les plus denses de type  $\{111\}$  et suit les directions les plus denses de type  $\langle 110 \rangle$  (**Figure 1.43**). Un système de glissement  $s$  est caractérisé par son plan normal (vecteur  $\underline{n}^s$ ) et sa direction de glissement (vecteur  $\underline{m}^s$ ). Par conséquent, pour un matériau CFC, 24 systèmes de glissement sont définis. Pour raison de la symétrie géométrique, le nombre de



systèmes de glissement est souvent réduit à 12, et repérés par la convention de Schmid et Boas (**Tableau 1.11**).

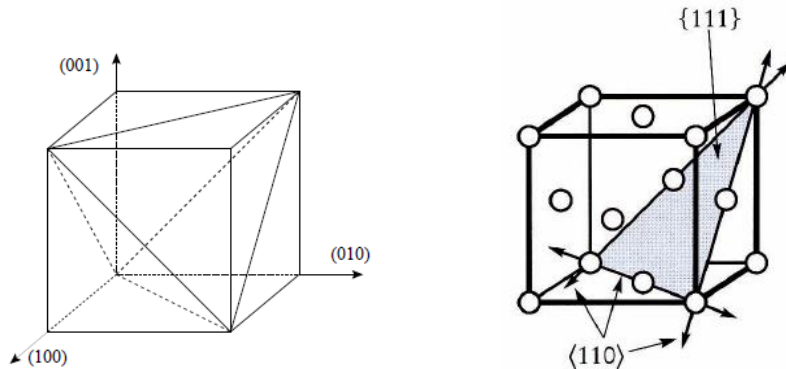


Figure 1.43 : Les systèmes de glissement pour les matériaux CFC : 4 plans de glissement de type {111}, et 3 directions de glissement de type <110> (au lieu de 6 pour raison de la symétrie) dans chaque plan de glissement.

s	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
<b>Nom</b>	B4	B2	B5	D4	D1	D6	A2	A6	A3	C5	C3	C1
$\underline{n}^s$	(111)			(1 $\bar{1}$ 1)			( $\bar{1}$ 11)			( $\bar{1}$ $\bar{1}$ 1)		
$\underline{m}^s$	$[\bar{1}01]$	$[0\bar{1}1]$	$[\bar{1}\bar{1}0]$	$[\bar{1}01]$	$[011]$	$[110]$	$[0\bar{1}1]$	$[110]$	$[101]$	$[\bar{1}\bar{1}0]$	$[101]$	$[011]$

Tableau 1.11 : 12 systèmes de glissement pour un cristal CFC, selon la convention de Schmid-Boas, avec n la normale aux plans de glissement et m la direction de glissement [Schmid et Boas (1935)].

- **Loi de Schmid** : la relation entre la contrainte de traction suivant la direction  $\underline{l}$  et la cisssion résolue sur un système de glissement s (**Figure 1.44**) :

$$\tau^s = \underline{\sigma} : \underline{N}^s = \sigma(\underline{l} \otimes \underline{l}) : (\underline{m}^s \otimes \underline{n}^s) = \sigma(\underline{n}^s \cdot \underline{l})(\underline{m}^s \cdot \underline{l}) = \sigma(\cos \chi \cos \theta)$$

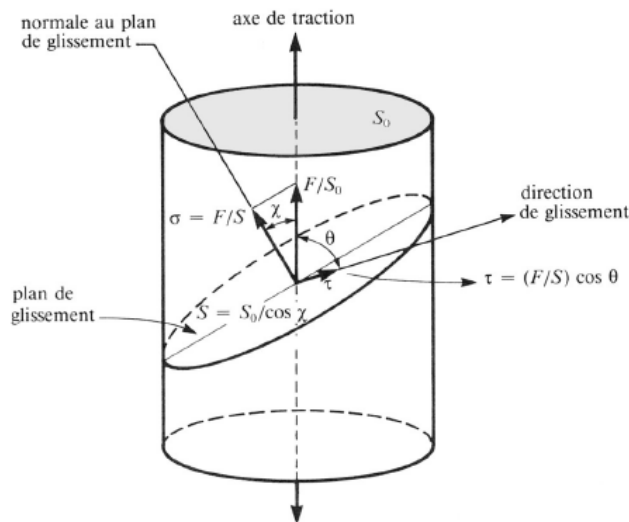


Figure 1.44 : Représentation de la loi de Schmid sur un monocristal.

où  $\chi$  représente l'angle entre la direction de traction et la normale au plan de glissement, et  $\theta$  représente l'angle entre la direction de traction et la direction de glissement. On note que tous les vecteurs  $\underline{l}$ ,  $\underline{m}^s$  et  $\underline{n}^s$  sont unitaires. Le facteur de Schmid peut s'exprimer par :

$$f_{Schmid} = \cos \chi \cos \theta = \frac{\tau^s}{\sigma} = (\underline{n}^s \cdot \underline{l})(\underline{m}^s \cdot \underline{l})$$

Schmid a formulé une condition générale de l'écoulement plastique sur un système de glissement, afin de déterminer les systèmes actifs. Le glissement  $\gamma^s$  du système  $s$  s'amorcera dès que la cission résolue  $|\tau^s|$  dépasse la cission résolue critique  $\tau_c^s$ . Le glissement et la cission résolue possèdent le même signe, ce qui permet de décrire les deux sens de glissement.

- **Projection cristallographique** : la loi de Schmid et la convention de Schmid et Boas permettent de réaliser une projection stéréographique pour repérer tous les systèmes de glissement sur un plan (**Figure 1.45**). Selon différentes directions de chargement projetées sur ce plan, un certain nombre de systèmes de glissement sera activé. Le nombre d'activation de systèmes de glissement est égal au nombre de triangles qui partagent la position de l'axe de chargement projetée. Si ce dernier se trouve à l'intérieur d'un triangle, un seul système de glissement sera activé (glissement simple). Et s'il est situé sur la frontière de plusieurs triangles, tous les systèmes de glissement dans ces triangles seront activés (glissement multiple).

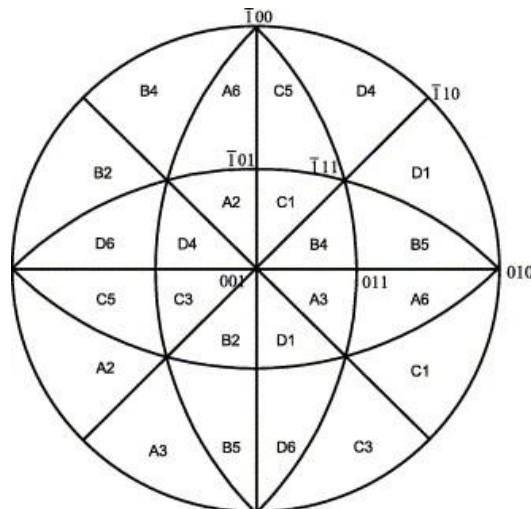


Figure 1.45 : Projection stéréographique faisant apparaître les systèmes de glissement, selon la convention de Schmid et Boas. L'activation de systèmes de glissement dépend de l'axe de chargement projeté sur le plan.

- **Angles d'Euler** : En science des matériaux, les angles d'Euler sont utilisés pour décrire l'orientation cristalline (orientation d'une cristallite par rapport aux axes de l'échantillon), notamment dans le domaine de l'analyse de texture (orientation préférentielle). Les angles sont alors en général notés par  $(\phi_1, \Phi, \phi_2)$  avec la convention de Bunge [Bunge (1965) et Bunge (1982)], en passant de la base globale  $xyz$  à la base locale  $x'y'z'$  (**Figure 1.46**).

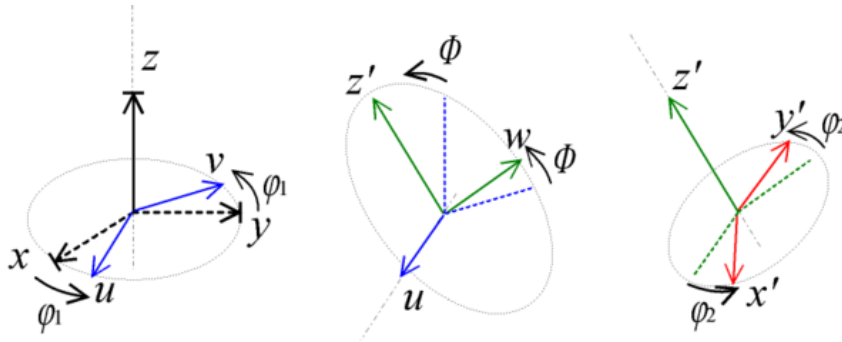


Figure 1.46 : Représentation des angles d'Euler selon la convention  $zxz$ .

### 1.4.3 Modèle de comportement du monocristal CFC

Pour étudier numériquement le comportement du monocristal de structure CFC, différents types de modèles ont été développés depuis les années 70. En général, on peut utiliser deux lois pour décrire la plasticité cristalline : une loi d'écoulement permettant de vérifier si un système de glissement est activé, et si tel est le cas de déterminer la vitesse de glissement de ce système, et une loi d'écrouissage pour décrire le durcissement sur chaque système activé suite à un glissement. On présente ici deux sortes de modèles monocristallins : le modèle physique de Teodosiu-Tabourot et le modèle phénoménologique de Cailletaud.

#### 1.4.3.1 Loi d'écoulement viscoplastique

Le passage du comportement individuel d'une dislocation à celui de la densité moyenne de dislocations sur le système  $s$  peut se faire en utilisant la relation d'Orowan :

$$\dot{\gamma}^s = \rho_m^s b \bar{v}^s \quad \text{Équation 1.1}$$

où  $\rho_m^s$  est la densité de dislocations mobiles,  $b$  est la norme du vecteur de Burgers et  $\bar{v}^s$  la vitesse moyenne d'une dislocation.

Teodosiu et Tabourot [Teodosiu (1975), Tabourot (1992) et Tabourot et al. (1997)] ont proposé une loi d'écoulement physique basée sur la théorie du mouvement thermiquement activé des dislocations pour chaque système de glissement :

$$\dot{\gamma}^s = \rho_m^s b^2 v_D \exp\left(\frac{-\Delta G}{kT}\right) \exp\left(\frac{(\tau^s - \tau_c^s)\Delta V}{kT}\right) \quad \text{Équation 1.2}$$

avec  $v_D$  la fréquence de Debye,  $\Delta G$  l'énergie d'activation relative au franchissement des obstacles à contrainte nulle,  $k$  la constante de Boltzmann,  $T$  la température,  $\Delta V$  le volume d'activation,  $\tau^s$  la cission résolue projetée sur le système de glissement  $s$  (24 systèmes de glissement pour un matériau CFC, sans tenir compte de la symétrie) et  $\tau_c^s$  la cission critique pour activer le glissement du système  $s$ .

Afin de faciliter les applications numériques [Tabourot(1992), Hoc et al. 2001 et Fivel et Forest (2004)], en faisant tendre  $\tau^s$  vers  $\tau_c^s$  et un développement limité au premier ordre en  $\tau^s / \tau_c^s$ , la loi d'écoulement de manière multiplicative peut s'écrire comme :

$$\dot{\gamma}^s = \begin{cases} \dot{\gamma}_0 \left| \frac{\tau^s}{\tau_c^s} \right|^n \text{signe}(\tau^s), & \text{si } |\tau^s| > \tau_c^s \\ 0, & \text{sinon} \end{cases}, \text{ en posant } \dot{\gamma}_0 = \rho_m^s b^2 v_D \exp\left(\frac{-\Delta G}{kT}\right) \text{ et } n = \frac{\tau_c^s \Delta V}{kT} \quad \text{Équation 1.3}$$

Pour un matériau CFC, cette loi est souvent valable dans une gamme de températures inférieure à  $0.3T_f$ , c'est-à-dire un régime de déformation à froid, pour que la cission thermiquement activée issue d'un champ de contraintes à courte distance reste petite.

Cailletaud [Cailletaud (1987) et Cailletaud (1992)] a développé un modèle de type micromécanique phénoménologique qui prend en compte les changements de trajet de chargement pour simuler le comportement anisotrope viscoplastique des monocristaux. Ce modèle viscoplastique à seuil consiste à proposer des variables d'écrouissage cinématique  $x^s$  et isotrope  $r^s$  attachées, de manière additive, à chaque système de glissement :

$$\dot{\gamma}^s = \left\langle \frac{|\tau^s - x^s| - r^s}{K} \right\rangle^n \text{sign}(\tau^s - x^s) \quad \text{Équation 1.4}$$

où  $n$  et  $K$  sont les paramètres de Norton qui caractérisent la viscosité,  $r^s$  représente l'écrouissage isotrope, décrit par une évolution de la cission critique.  $\langle \bullet \rangle = (\bullet)$  si  $\bullet \geq 0$ ,  $\langle \bullet \rangle = 0$  sinon.

On remarque que la loi phénoménologique à seuil vérifie bien la loi de Schmid, qui donne une condition générale d'écoulement sur un système de glissement. Tant que  $|\tau^s - x^s| < r^s$ , il n'existe aucun glissement, car tous les systèmes de glissement sont inactivés.

### 1.4.3.2 Loi d'écrouissage pour les matériaux à l'état non-irradié

La contrainte de tension de ligne est à l'origine physique de l'écrouissage isotrope, dont l'effet se représente par une contrainte interne indépendante du sens de chargement. L'expression de la contrainte de tension de ligne  $\tau_\mu$  dépend uniquement de la longueur du segment de dislocation entre les obstacles  $l$  :  $\tau_\mu \approx \frac{\alpha \mu b}{l}$ , avec  $\alpha$  le paramètre d'écrouissage et  $\mu$  le module de cisaillement. Si la répartition des obstacles reste uniforme, la longueur moyenne du segment de dislocation entre ces obstacles peut s'exprimer approximativement en fonction de la racine carrée de la densité de dislocations de la forêt par :  $l \approx \frac{1}{\sqrt{\rho}}$ .

La contrainte appliquée doit dépasser la tension de ligne, afin de faire déplacer une ligne de dislocation. La limite d'activation du mouvement de dislocations sur le système  $s$  de glissement peut être définie par :  $\tau_{\mu}^s = \alpha \mu b \sqrt{\rho}$ , où  $\rho$  est la densité de dislocations forêts de tous les systèmes [Mecking et Kocks (1981)]. Le paramètre de l'écrouissage  $\alpha$  est de l'ordre de 0.35 pour les matériaux CFC [Saada (1960) et Madec (2001)].

On suppose que  $\tau_{\mu}^s$  est indépendant de la température. Selon ce modèle physique, la cission critique athermique  $\tau_{\mu}^s$  pour activer le glissement d'un système  $s$  dépend de la densité de dislocations de tous les systèmes de glissement et de l'effet des interactions entre les systèmes de glissement. Les auteurs [Franciosi (1984), Franciosi (1985) et Tabourot (1992)] ont généralisé l'expression de la cission critique athermique comme :

$$\tau_{\mu}^s = \mu b \sqrt{\sum_u a^{su} \rho^u} \quad \text{Équation 1.5}$$

La cission critique complète  $\tau_c^s$  peut s'exprimer comme la somme de la partie athermique  $\tau_{\mu}^s$  et de la friction du réseau cristallin  $\tau_0$  qui dépend de la température :  $\tau_c^s = \tau_0 + \tau_{\mu}^s$ .

La loi ci-dessus est souvent utilisée dans le cas du comportement d'un matériau CFC à haute température. Notons  $\rho^u$  la densité de dislocations forêts du système  $u$ , et  $a^{su}$  la matrice d'interaction 12x12 qui sera présentée dans la section suivante. Cette dernière est préférablement utilisée dans notre modèle de plasticité cristalline par rapport à un simple paramètre de l'écrouissage  $\alpha$ , afin de mieux décrire les interactions entre dislocations.

Pour compléter la relation d'écrouissage isotrope, on a besoin maintenant d'une loi d'évolution des densités de dislocations pour calculer la cission critique. Classiquement, la densité de dislocations sur le système de glissement  $s$  se décompose en deux termes : un terme de multiplication (ou de stockage) basée sur la relation d'Orowan et un autre terme d'annihilation [Mecking et Lucke (1970), Essman et Mughrabi (1979) et Mecking et Kocks (1981)]. Elle peut s'écrire alors :

$$\dot{\rho}^s = \frac{1}{b} \left( \frac{1}{L^s} - g_c \rho^s \right) |\dot{\gamma}^s| \quad \text{Équation 1.6}$$

Pour le terme de multiplication,  $L^s$  présente le libre parcours moyen des dislocations mobiles avant d'être immobilisées par les obstacles, ce qui dépend de la racine carrée de dislocations forêt :

$$L^s = \frac{K}{\sqrt{\sum_{u \neq s} \rho^u}} \quad \text{Équation 1.7}$$

avec  $K$  le facteur de proportionnalité qui compte le nombre des obstacles franchis par une dislocation avant son arrêt.

Quant au terme d'annihilation, le facteur de proportionnalité  $g_c=2y_c$  dépend du mécanisme d'annihilation des dipôles de dislocations, avec  $y_c=R\beta$  une constante appelée distance moyenne d'annihilation de la densité de dislocations.

On obtient maintenant l'expression complète de la loi d'évolution des densités de dislocations du modèle de Teodosiu-Tabourot :

$$\dot{\rho}^s = \frac{1}{b} \left( \frac{\sqrt{\sum_{u \neq s} \rho^u}}{K} - g_c \rho^s \right) |\dot{\gamma}^s| \quad \text{Équation 1.8}$$

Il est à noter que la loi présentée précédemment permet de décrire l'écroissage isotrope. Selon des études [Ashby (1970), Feaugas (1999) et Mughrabi (2001)], les incompatibilités intergranulaire et intragranulaire de déformation plastique provoquent en plus un écroissage cinématique. Le comportement plastique à écroissages isotrope et cinématique du cristal CFC comprenant les lois d'évolution des densités de dislocations a été étudié dans la thèse de Saai [Saai (2007)].

Dans le modèle de Cailletaud [Cailletaud (1988) et Méric et Cailletaud (1991)], l'écroissage ( $x^s$  et  $r^s$ ) est de type additif. La loi d'évolution non linéaire de l'écroissage isotrope peut être définie sous la forme explicite :

$$r^s = r_0 + Q \sum_r h^{sr} [1 - \exp(-Bv^r)], \text{ avec } \dot{v}^s = |\dot{\gamma}^s| \quad \text{Équation 1.9}$$

où  $Q$  et  $B$  sont deux paramètres qui interviennent dans la fonction exponentielle permettant une saturation de la cission critique,  $h^{sr}$  est la matrice d'écroissage prenant la même forme que  $a^{su}$  décrite par Franciosi, et le glissement plastique cumulé est noté  $v^s$ .

Pour compléter la description, on introduit aussi une loi d'évolution non linéaire de l'écroissage cinématique :

$$x^s = ca^s, \text{ avec } \dot{a}^s = \dot{\gamma}^s - d|\dot{\gamma}^s|a^s - \left( \frac{|a^s|}{M} \right)^m \text{sign}(a^s) \quad \text{Équation 1.10}$$

Cette loi permet une saturation sous chargement monotone et en glissement simple, vers  $c/d$ . Un terme supplémentaire de restauration statique (décrite par les coefficients  $M$  et  $m$ ) est introduit pour une meilleure description des phénomènes de fluage et relaxation. Ce modèle prend en compte aussi l'effet Bauschinger dans le cadre des chargements cycliques.

Un parallèle analytique entre le modèle physique de Teodosiu-Tabourot et le modèle phénoménologique de Cailletaud est réalisé dans différentes littératures [Gérard (2008) et Fivel et Forest (2004)]. La forme de la loi d'évolution de la densité de dislocations permet de réconcilier a posteriori ces deux approches.

### 1.4.3.3 Loi d'écroissage en prenant compte de l'effet d'irradiation

D'après la **Section 1.2** et la **Section 1.3**, nous avons décrit les différents types de défauts formés au cours de l'irradiation. Les boucles de Frank qui font partie de la microstructure de dislocations dans un matériau à l'état irradié sont considérées dans la littérature comme une source importante du durcissement par irradiation. De même, leur annihilation suite à une déformation plastique conduit à un phénomène d'adoucissement. Sous certaines hypothèses, dans le cas du durcissement par interaction avec les dislocations de forêt, Friedel et Kelly [Friedel (1964) et Kelly et Nicholson (1971)] ont originalement proposé que l'augmentation de la cission critique soit proportionnelle à la racine carrée de la densité des boucles :

$$\Delta\tau_c = \alpha_i \mu b \sqrt{Nd} \quad \text{Équation 1.11}$$

où  $\alpha_i$  présente la force d'obstacles effective des boucles de Frank,  $\mu$  est le module de cisaillement,  $b$  est la norme du vecteur de Burgers pour les boucles de dislocations,  $N$  est la densité en nombre par unité de volume de ces boucles, et  $d$  le diamètre moyen des boucles de dislocations. Ici, on peut noter une densité surfacique (areal density) de boucles par [Lucas (1993)], dont l'unité est  $m^{-2}$  comme celle de la densité de dislocations.

Mughrabi [Mughrabi et al. (1993)] montre que l'énergie des jonctions entre dislocations et boucles est bien supérieure à l'énergie apportée par l'activation thermique. Ce résultat permet de simplifier l'expression de la cission critique, car le durcissement lié aux jonctions entre dislocations et boucles est donc pris en compte au niveau de la cission critique athermique comme celui lié aux dislocations. Onimus [Onimus (2003)] propose une expression complète de la cission critique du système  $s$  qui peut s'écrire comme la racine carrée de la somme des densités de dislocations et de boucles, pour un alliage de zirconium, en distinguant les forces d'obstacles effectives des dislocations  $\alpha$  et des boucles  $\alpha_i$  (**Équation 1.12**). Krishna utilise également ce type d'expression « **la racine de la somme** » dans ses travaux [Krishna et al. (2010) et Krishna et De (2011)].

$$\tau_\mu^s = \tau_0 + \mu b \sqrt{\alpha^2 \sum_u \rho^u + \alpha_i^2 Nd} \quad \text{Équation 1.12}$$

Différente de celle présentée ci-dessus, la cission critique du système  $s$  qui peut s'exprimer comme la somme des racines carrées des densités de dislocations et de boucles de Frank (**Équation 1.13**). Ce genre de modèle « **la somme des racines** » est inspiré directement par **Équation 1.11** et aussi largement utilisé que le modèle « la racine de la somme » pour modéliser la cission critique en prenant compte de l'effet d'irradiation [Friedel (1964), Kelly et Nicholson (1971), Pokor (2003), Pokor et al. (2004a) et Pokor et al. (2004b)]. A notre connaissance, il n'y a à ce jour aucune étude spécifique aux échelles inférieures par DDD ou DM pour justifier quel modèle correspond mieux à la physique.

$$\tau_\mu^s = \tau_0 + \mu b \left( \alpha \sqrt{\sum_u \rho^u} + \alpha_i \sqrt{Nd} \right) \quad \text{Équation 1.13}$$

La loi d'évolution de la densité de dislocations pour un matériau irradié garde la même forme que celle pour un matériau non irradié dans la littérature. Par ailleurs, il faut maintenant fournir une loi d'évolution de la densité de boucles. En prenant en compte le mécanisme d'annihilation de boucles de

Frank par le passage des dislocations dans les canaux, les bandes claires formées provoquent un adoucissement local dans le matériau. Rodney puis Pokor et Onimus [Rodney et al. (2001), Onimus (2003), Pokor (2003) et Pokor et al. (2004a)] ont proposé une loi d'évolution de la densité de boucles par :

$$\dot{N} = -\rho NH\bar{v} \quad \text{Équation 1.14}$$

où  $\rho$  est la densité de dislocations,  $H/2$  représente une distance critique au plan de glissement de dislocation afin de capturer les boucles, et  $\bar{v}$  est la vitesse moyenne de dislocations. En appliquant la relation d'Orowan  $\dot{\gamma} = -\rho b\bar{v}$ , on peut établir son expression finale, en fonction du glissement cumulé sur tous les systèmes concernés :

$$\dot{N} = -\frac{H}{b} N \sum_p |\dot{\gamma}^p| \quad \text{Équation 1.15}$$

Basé sur le mécanisme d'annihilation de dislocations développé par Cheong et Busso [Cheong et Busso (2004)], Krishna et al. [Krishna et al. (2010) et Krishna et De (2011)] ont proposé un modèle très complet de la loi d'évolution des défauts d'irradiation  $\dot{\rho}_{def}^\alpha$ , en prenant en compte la probabilité d'annihilation  $P_{ann}$  et la densité de défauts stabilisés  $\rho_{sdef}^\alpha$ . Pour un système de glissement  $\alpha$  ( $\alpha = 1 \dots 24$ ), la probabilité d'annihilation  $P_{ann} = A_s^\alpha \rho_d^\alpha$  s'exprime par le produit de l'aire d'annihilation de défauts d'irradiation  $A_s^\alpha$  (qui dépend de la distance critique de « stand-off »  $d_s$  et du libre parcours moyen  $L^\alpha$ ) par la densité de dislocations  $\rho_d^\alpha$ . Cette loi s'écrit alors :

$$\dot{\rho}_{def}^\alpha = -\left(A_s^\alpha \rho_d^\alpha\right) \left(\rho_{def}^\alpha - \rho_{sdef}^\alpha\right) \frac{d_{def}^\alpha}{b^\alpha} \dot{\gamma}^\alpha, \text{ avec } A_s^\alpha = \left[2d_s L^\alpha + \pi d_s^2\right] \quad \text{Équation 1.16}$$

#### 1.4.4 Interactions entre dislocations

Depuis les années 60, Hirth a commencé les études sur les interactions entre dislocations de différents systèmes de glissement [Hirth (1960)]. Il existe de nombreuses études expérimentales sur l'écroissage des monocristaux CFC [Jackson et Basinski (1976), Miyaoto et al. (1977), Franciosi et al. (1980), Franciosi (1985) et Wu et al. (1991)]. Les essais de durcissement latent fournissent un moyen qui permet d'évaluer les interactions entre les dislocations primaires créées par une pré-déformation en glissement simple et les dislocations activées par une seconde étape de l'essai. Selon les essais, différents types d'interactions entre le système primaire et le système latent ont été mis en évidence. Lorsque les systèmes sont sécants, ils peuvent former des jonctions ou des verrous : la jonction glissile, le verrou de Hirth et le verrou de Lomer (jonction sessile). En plus, 3 autres systèmes peuvent également intervenir dans les interactions : auto-écrouissage (système avec lui-même), interaction coplanaire (systèmes avec les mêmes plans de glissement) et interaction colinéaire (entre un système et son système dévié). A partir de tous les essais expérimentaux, un classement de ces six interactions d'après [Franciosi (1985) et Bassani et Wu (1991)] est donné par :

***Auto-écrouissage < Colinéaire < Hirth < Coplanaire < Glissile < Lomer***



Le développement progressif depuis les années 90 de la méthode numérique de Dynamique des Dislocations Discrètes (DDD) permet de fournir plus d'informations quantitatives sur les interactions entre dislocations [Kubin et Canova (1992) et Devincere et al. (1992)]. Le modèle DDD peut servir à identifier les coefficients de la matrice d'interaction dans le modèle de plasticité cristalline basé sur la densité de dislocations. Par exemple, les coefficients d'interaction entre différents systèmes de glissement, notés par  $a^{su}$ , utilisés dans la loi d'écroissage peuvent être déterminés par une mesure de la contrainte de cisaillement appliquée sur un système  $s$  pour que ce système puisse traverser une population de dislocations forêts sur un système  $u$  avec une densité de dislocations  $\rho^u$  [Fivel (1997)].

Ici, on introduit la notion de matrice d'interaction (ou la matrice de force) permettant de prendre en compte les interactions entre systèmes de glissement dans la loi d'écroissage du modèle monocristallin. Basée sur le modèle de Mandel [Mandel, 1965] en dissociant l'auto-écrouissage et l'écrouissage latent, Franciosi [Franciosi (1984) et Franciosi (1985)] propose une matrice 12x12 symétrique pour décrire les interactions des systèmes octaédriques CFC (**Tableau 1.12**). De fait de sa forme complète et sa signification physique de ses termes d'interaction entre les systèmes de glissement, cette matrice d'interaction  $a^{su}$  est construite à partir de 6 coefficients indépendants (**Tableau 1.13**).

	A2	A3	A6	B2	B4	B5	C1	C3	C5	D1	D4	D6
A2	$a_1$	$a_2$	$a_2$	$a_4$	$a_5$	$a_5$	$a_3$	$a_5$	$a_6$	$a_3$	$a_6$	$a_5$
A3		$a_1$	$a_2$	$a_5$	$a_3$	$a_6$	$a_5$	$a_4$	$a_5$	$a_6$	$a_3$	$a_5$
A6			$a_1$	$a_5$	$a_6$	$a_3$	$a_6$	$a_5$	$a_3$	$a_5$	$a_5$	$a_4$
B2				$a_1$	$a_2$	$a_2$	$a_3$	$a_6$	$a_5$	$a_3$	$a_5$	$a_6$
B4					$a_1$	$a_2$	$a_6$	$a_3$	$a_5$	$a_5$	$a_4$	$a_5$
B5						$a_1$	$a_5$	$a_5$	$a_4$	$a_6$	$a_5$	$a_3$
C1							$a_1$	$a_2$	$a_2$	$a_4$	$a_5$	$a_5$
C3								$a_1$	$a_2$	$a_5$	$a_3$	$a_6$
C5									$a_1$	$a_5$	$a_6$	$a_3$
D1										$a_1$	$a_2$	$a_2$
D4											$a_1$	$a_2$
D6												$a_1$

**Symétrique**

Tableau 1.12 : Matrice d'interaction des systèmes de glissement pour une structure CFC [Franciosi (1985)].

<i>L'interaction entre les dislocations d'un même système, <math>a^{su}</math> pour <math>s=u</math></i>	
$a_1$	auto-écrouissage (interaction du système avec lui-même)
<i>Les interactions entre différents systèmes de glissement, <math>a^{su}</math> pour <math>s \neq u</math></i>	
$a_2$	interaction coplanaire (avec le même plan de glissement $\underline{n}$ )
$a_3$	formation de verrous de Hirth (interaction entre les dislocations sur les systèmes orthogonaux)
$a_4$	interaction colinéaire (interaction entre un système et son système dévié, avec les mêmes vecteurs de Burgers $\underline{m}$ )
$a_5$	formation de jonctions glissiles
$a_6$	formation de verrous de Lomer (jonctions sessiles)

Tableau 1.13 : Six paramètres dans la matrice d'interaction pour une structure CFC.

Les coefficients qui conduisent à la formation de jonctions de Lomer et des jonctions glissiles étaient attendus comme les plus grands, ce qui permettait d'expliquer le stade de l'écroissage important gouverné par l'interaction entre systèmes sécants en glissement double. D'après les études de DDD, certains auteurs [Madec (2001), Madec et al. (2003) et Devindre et al. (2006)] ont trouvé que le glissement dévié joue un rôle important dans l'organisation de la microstructure. En plus, ils ont montré que l'interaction colinéaire présente une valeur beaucoup plus forte que celle initialement considérée, car de nombreuses annihilations entre les systèmes primaires et déviés interviennent dans le durcissement. Par conséquent, de nombreux petits segments sont produits dans le plan de glissement primaire, limités par des nœuds à l'intersection des plans primaire et dévié. Les nœuds et les petits segments de dislocations deviennent des sources fortes de durcissement.

A partir des simulations de DDD, un nouveau classement de 4 interactions non-coplanaires (**Tableau 1.14**) est obtenu :

***Hirth < Lomer < Glissile < Colinéaire***

<b>Groupe</b>	<b>Jonctions entre systèmes sécants</b>			<b>Annihilation entre systèmes différents</b>	<b>Références</b>
<b>Coefficient</b>	$\alpha_3$	$\alpha_6$	$\alpha_5$	$\alpha_4$	
<b>Valeur en moyen</b>	0.05	0.069	0.95	0.55	[Madec (2001)]
	0.051	0.084	0.075	1.265	[Madec, 2003]
	0.0454	0.122	0.137	0.625	[Devindre, 2006]

Tableau 1.14 : Classement des interactions non-coplanaires obtenues par la DDD.

Selon des études récentes, la formation de jonction de Hirth a été réévaluée [Devindre et al. (2008) et Kubin et al. (2008)]. Elles proposent que l'auto-écrouissage et l'interaction coplanaire soient de l'ordre de la formation de jonctions de Lomer. En fait, les interactions dipolaires sont fortement liées à l'annihilation des petits segments de dislocations vis par les systèmes déviés et à la formation de "superjogs" colinéaires. A partir des coefficients publiés dans [Kubin et al. (2008)], les 6 coefficients d'interaction pour les aciers inoxydables austénitiques de type AISI 300 sont également proposés, en corrigeant légèrement les interactions dipolaires [Monnet (2009)] (**Tableau 1.15**). On note que ces coefficients sont identifiés par la méthode DDD pour une température ambiante. Aucune donnée n'a été reportée dans la littérature ouverte sur l'influence de la température sur les coefficients d'interaction.

<b>Groupe</b>	<b>Interactions dipolaires</b>		<b>Jonctions entre systèmes sécants</b>			<b>Annihilation entre systèmes différents</b>	<b>Références</b>
<b>Coefficient</b>	$\alpha_2$	$\alpha_1$	$\alpha_3$	$\alpha_6$	$\alpha_5$	$\alpha_4$	
<b>Valeur en moyen</b>	0.122	0.122	0.07	0.122	0.137	0.625	[Kubin et al. (2008)]
	0.124	0.124	0.07	0.122	0.137	0.625	[Monnet (2009)]

Tableau 1.15 : Valeurs des coefficients d'interaction entre dislocations obtenus par la DDD.

### **1.4.5 Bilan – modèle monocristallin pour les aciers inoxydables austénitiques**

Selon la recherche bibliographique dans cette section, une modélisation de la loi de comportement à l'échelle cristalline permet de simuler le comportement d'un matériau à l'échelle mésoscopique (polycristalline) en appliquant des informations récupérées à partir des échelles plus fines. Les aciers inoxydables austénitiques présentent une structure Cubique à Faces Centrées (CFC). 12 systèmes de glissement ont été repérés par la convention de Schmid et Boas. Une matrice d'interaction entre dislocations a été choisie, dont 6 coefficients ont été identifiés par G. Monnet en utilisant la méthode DDD.

Deux modèles monocristallins ont été présentés précédemment : le modèle physique de Teodosiu-Tabourot et le modèle phénoménologique de Cailletaud. Des lois d'écoulement et d'écrouissage ont été détaillées respectivement. Dans le cadre de ma thèse, la loi d'écrouissage est basée sur une loi d'évolution de la densité de dislocations et une loi d'évolution de la densité de boucles de Frank pour les matériaux à l'état irradié. Selon différentes façons d'exprimer le durcissement par les boucles de Frank, deux modèles « la racine de la somme » et « somme des racines » ont été établis pour la suite de la thèse.

# Chapitre 2 : Modèle micromécanique à l'échelle cristalline

Afin d'étudier les propriétés mécaniques à l'échelle macroscopique des aciers inoxydables austénitiques aux états non-irradié et irradié, on envisage de développer une approche multi-échelles s'appuyant sur des calculs mécaniques d'agrégats de grains par la méthode des éléments finis. L'objectif ici est alors de fournir à cette modélisation une loi de comportement cristalline en grandes transformations en tenant compte de l'évolution microstructurale des densités de dislocations et des défauts d'irradiation, pour une température et une dose d'irradiation données.

L'implémentation numérique de cette loi cristalline a été réalisée dans les codes de calcul par éléments finis ZéBuLoN [Besson et Foerch (1998) et Besson et al. (1998)] (code développé par l'école des Mines Paris) et Cast3M (code développé par le CEA).

## 2.1 Formalisme en grandes transformations

Dans cette partie, on présente la cinématique et la plasticité du monocristal en grandes transformations. Les notations tensorielles et les formules utilisées dans ce chapitre sont présentées dans l'**Annexe I. 1**.

On définit  $C_0$  et  $C_t$  les configurations d'un milieu continu à l'état initial et à l'instant  $t$ . Pour une transformation, on définit  $\underline{X}$  la position d'un point dans la configuration initiale  $C_0$  et  $\underline{x}$  la position d'un point dans la configuration actuelle  $C_t$ . Le tenseur gradient de la transformation s'écrit comme :  $\underline{F} = \partial \underline{x} / \partial \underline{X}$ .

Soit  $\underline{v} = \dot{\underline{x}}$  le champ de vitesse du point  $\underline{x}$  dans la configuration actuelle. Le tenseur gradient du vecteur vitesse est donné par :  $\underline{L} = \text{grad} \underline{v} = \frac{\partial \dot{\underline{x}}}{\partial \underline{x}} = \dot{\underline{F}} \cdot \underline{F}^{-1}$ .

Dans le cas de la plasticité cristalline, on utilise une décomposition multiplicative du tenseur gradient de la transformation  $\underline{F}$  en deux parties : une transformation plastique  $\underline{P}$  qui correspond à l'écoulement plastique induit par les cisaillements entre différents systèmes de glissement, et une transformation élastique  $\underline{E}$ , qui décrit une déformation pure élastique et une rotation de corps rigide du réseau cristallin. Mandel [Mandel (1973)] a proposé une configuration intermédiaire relâchée isocline  $\overline{C}_t$  (la configuration qui possède la même orientation du réseau cristallin initial), qui permet de réaliser premièrement une transformation plastique depuis la configuration initiale vers la configuration relâchée isocline, et suivie d'une transformation élastique depuis la configuration relâchée isocline vers la configuration actuelle (**Figure 2.1**) :

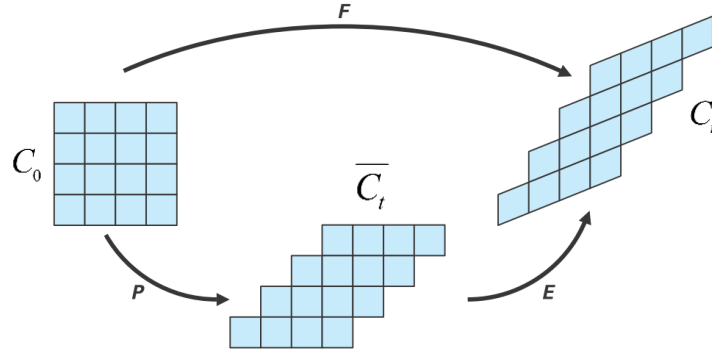


Figure 2.1 : Décomposition du tenseur gradient de la déformation : configurations initiale, relâchée isocline et actuelle.

Le gradient du vecteur vitesse peut s'exprimer :

$$\underline{\underline{L}} = \underline{\underline{\dot{F}}} \cdot \underline{\underline{F}}^{-1} = (\underline{\underline{\dot{E}}} \cdot \underline{\underline{P}} + \underline{\underline{E}} \cdot \underline{\underline{\dot{P}}}) \cdot \underline{\underline{P}}^{-1} \cdot \underline{\underline{E}}^{-1} = \underline{\underline{\dot{E}}} \cdot \underline{\underline{E}}^{-1} + \underline{\underline{E}} \cdot \underline{\underline{\dot{P}}} \cdot \underline{\underline{P}}^{-1} \cdot \underline{\underline{E}}^{-1} = \underline{\underline{L}}^e + \underline{\underline{E}} \cdot \underline{\underline{L}}^p \cdot \underline{\underline{E}}^{-1} \quad \text{Équation 2.1}$$

avec  $\underline{\underline{L}}^e = \underline{\underline{\dot{E}}} \cdot \underline{\underline{E}}^{-1}$  et  $\underline{\underline{L}}^p = \underline{\underline{\dot{P}}} \cdot \underline{\underline{P}}^{-1}$  les gradients de la transformation associés respectivement aux deux parties de la transformation, alors le tenseur  $\underline{\underline{L}}$  peut s'écrire comme la somme de sa composante élastique et de sa composante plastique transportée dans la configuration actuelle. On définit le tenseur vitesse de déformation par :  $\underline{\underline{D}} = \text{sym}(\underline{\underline{L}}) = \frac{1}{2}(\underline{\underline{L}} + \underline{\underline{L}}^T)$ .

Dans la configuration intermédiaire, on définit le tenseur des dilatations élastiques Cauchy-Green droit par :  $\underline{\underline{C}}^e = \underline{\underline{E}}^T \cdot \underline{\underline{E}}$ . La déformation élastique de Green-Lagrange est donc définie comme :

$$\underline{\underline{E}}_{GL}^e = \frac{1}{2}(\underline{\underline{C}}^e - \underline{\underline{1}}) = \frac{1}{2}(\underline{\underline{E}}^T \cdot \underline{\underline{E}} - \underline{\underline{1}}).$$

Ici, on note  $\underline{\underline{\sigma}}$  le tenseur des contraintes de Cauchy défini dans la configuration actuelle. Le second tenseur (symétrique) de Piola-Kirchhoff défini dans la configuration intermédiaire  $\underline{\underline{\Pi}}^e$  s'exprime :

$$\underline{\underline{\Pi}}^e = J_E \underline{\underline{E}}^{-1} \cdot \underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{\underline{E}}^{-T}, \text{ avec } J_E = \det(\underline{\underline{E}}) = \frac{\rho_i}{\rho} = \frac{\rho_0}{\rho} \quad \text{Équation 2.2}$$

avec respectivement  $\rho_0$ ,  $\rho_i$  et  $\rho$  les densités dans les configurations initiale, intermédiaire et actuelle, étant donné que les déformations plastiques ont lieu à volume constant pour un matériau non endommagé :  $\rho_0 = \rho_i$ .

Pour une transformation complète, la puissance développée par les contraintes s'exprime :

$$P = \frac{1}{\rho} \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{D}} = \frac{1}{\rho} \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{L}} = \frac{1}{\rho} \underline{\underline{\sigma}} : (\underline{\underline{L}}^e + \underline{\underline{E}} \cdot \underline{\underline{L}}^p \cdot \underline{\underline{E}}^{-1}) = \frac{1}{\rho} \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{L}}^e + \frac{1}{\rho} \underline{\underline{\sigma}} : (\underline{\underline{E}} \cdot \underline{\underline{L}}^p \cdot \underline{\underline{E}}^{-1}) \quad \text{Équation 2.3}$$

D'après le calcul présenté dans l'**Annexe I. 2**, on peut obtenir deux composantes exprimées dans la configuration intermédiaire :

$$\underline{\underline{P}} = \frac{1}{\rho_i} \underline{\underline{\Pi}}^e : \underline{\underline{\dot{E}}}_{GL}^e + \frac{1}{\rho_i} \underline{\underline{M}} : \underline{\underline{L}}^p \quad \text{Équation 2.4}$$

Enfin, selon cette formule, on peut en déduire que le second tenseur de Piola-Kirchhoff (*PK2*)  $\underline{\underline{\Pi}}^e$  (qui est symétrique contrairement au tenseur *PK1*) peut être utilisé pour la loi élastique et un tenseur des contraintes conjugué à la vitesse de déformation plastique - le tenseur de Mandel  $\underline{\underline{M}} = J_E \underline{\underline{E}}^T \cdot \underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{\underline{E}}^{-T}$  doit être utilisé pour décrire la loi d'écoulement.

On choisit la loi d'élasticité :  $\underline{\underline{\Pi}}^e = \underline{\underline{\Lambda}} : \underline{\underline{E}}_{GL}^e$ , avec  $\underline{\underline{\Lambda}}$  le tenseur d'élasticité d'ordre 4. Et le tenseur de Mandel peut s'exprimer :  $\underline{\underline{M}} = J_E \underline{\underline{E}}^T \cdot \underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{\underline{E}}^{-T} = \underline{\underline{E}}^T \cdot \underline{\underline{E}} \cdot \underline{\underline{\Pi}}^e = \underline{\underline{C}}^e \cdot \underline{\underline{\Pi}}^e$ .

Dans la configuration intermédiaire, pour un modèle de plasticité cristalline, le tenseur gradient du vecteur vitesse associé au glissement plastique en grandes déformations  $\underline{\underline{L}}^p$  sur les différents systèmes de glissement dits octaédriques pour les matériaux CFC (12 systèmes de type  $\{111\}\langle 110 \rangle$ ) peut être défini comme :

$$\underline{\underline{L}}^p = \sum_{s=1}^{12} \dot{\gamma}^s \underline{\underline{N}}^s, \text{ avec } \underline{\underline{N}}^s = \underline{\underline{m}}^s \otimes \underline{\underline{n}}^s \quad \text{Équation 2.5}$$

Le tenseur de Schmid du système de glissement  $s$  est défini par le produit tensoriel entre la direction de glissement  $\underline{\underline{m}}^s$  et la normale aux plans de glissement  $\underline{\underline{n}}^s$ , dans la configuration isocline. On remarque que le tenseur de Schmid est un tenseur généralement non-symétrique. En décomposant ce tenseur, on peut obtenir la partie symétrique du tenseur de Schmid comme :

$$\underline{\underline{N}}_{sym}^s = (\underline{\underline{m}}^s \otimes \underline{\underline{n}}^s)_{sym} = \frac{1}{2} (\underline{\underline{m}}^s \otimes \underline{\underline{n}}^s + \underline{\underline{n}}^s \otimes \underline{\underline{m}}^s).$$

Pour la plasticité cristalline, on peut déduire  $\underline{\underline{M}} : \underline{\underline{L}}^p = \sum_{s=1}^{12} \dot{\gamma}^s \tau^s$ . La cission résolue projetée sur le système de glissement  $s$  peut donc s'exprimer :  $\tau^s = \underline{\underline{M}} : \underline{\underline{N}}^s$ . Dans le cas des métaux, la déformation pure élastique reste faible ( $\underline{\underline{E}}_{GL}^e \approx \underline{\underline{0}}$ , donc  $\underline{\underline{C}}^e \approx \underline{\underline{1}}$ ). Cette approximation permet de proposer l'expression suivante, pour la cission résolue :

$$\tau^s = \underline{\underline{M}} : \underline{\underline{N}}^s = (\underline{\underline{C}}^e \cdot \underline{\underline{\Pi}}^e) : \underline{\underline{N}}^s \approx \underline{\underline{\Pi}}^e : \underline{\underline{N}}^s = \underline{\underline{\Pi}}^e : \underline{\underline{N}}_{sym}^s \quad \text{Équation 2.6}$$

Ici, l'approximation de la cission résolue présentée ci-dessus est également implantée dans le code de calcul, à titre d'une comparaison des résultats, mais elle ne sera pas utilisée pour les calculs dans la suite de notre travail.

## 2.2 Loi de comportement du monocristal retenu

En prenant en compte l'évolution des densités de dislocations et de défauts d'irradiation, on présente dans cette section les lois de comportement adoptées pour les aciers inoxydables austénitiques non irradiés et irradiés, à l'échelle monocristalline.

Comme présenté dans la **Section 1.4.3**, afin d'étudier numériquement le comportement d'un matériau à l'échelle monocristalline, en général, deux lois sont utilisées pour décrire la plasticité cristalline : une loi d'écoulement permettant de vérifier l'activation d'un système de glissement, et le cas échéant, de déterminer la vitesse de glissement de ce système ; en outre une loi d'écrouissage pour décrire le durcissement sur chaque système activé suite à un glissement, en prenant en compte l'évolution des défauts étendus créés au sein du matériau.

La loi d'écoulement adoptée pour les matériaux à l'état irradié est identique à celle à l'état non-irradié : le modèle de Cailletaud d'une manière simple [Hoc et al. (2001)], sous forme d'une loi puissance de type Norton, sans le terme d'écrouissage cinématique, cette étude ne s'intéressant qu'au chargement monotone :

$$\dot{\gamma}^s = \left\langle \frac{|\tau^s| - \tau_c^s}{K_0} \right\rangle^n \text{sign}(\tau^s) = \left\langle \frac{\tau_{eff}^s}{K_0} \right\rangle^n \text{sign}(\tau^s) \quad \text{Équation 2.7}$$

où  $s$  ( $s=1...12$ ) est le numéro du système de glissement présenté dans le **Tableau 1.11**,  $n$  et  $K_0$  sont les paramètres de Norton qui caractérisent la viscosité.  $\tau_c^s$  représente l'écrouissage isotrope, décrit par une évolution de la cission critique sur chaque système de glissement.  $\tau_{eff}^s = |\tau^s| - \tau_c^s$  est la contrainte dite effective, pour décrire la viscosité,  $\langle \bullet \rangle = (\bullet)$  si  $\bullet \geq 0$ ,  $\langle \bullet \rangle = 0$  sinon.

Les lois d'écrouissage retenues sont basées sur l'évolution des densités de dislocations et/ou de boucles de Frank, pour les matériaux aux états non-irradiés et irradiés. Par conséquent, on va les présenter respectivement comme suit :

### 2.2.1 Pour les matériaux à l'état non-irradié

Il n'y a que les dislocations qui interviennent dans le durcissement du matériau. La cission critique s'écrit donc :

$$\tau_c^s = \tau_0 + \tau_\mu = \tau_0 + \mu b_D \sqrt{\sum_u a^{su} \rho_D^u} \quad \text{Équation 2.8}$$

avec  $\rho_D^u$  la densité de dislocations du système  $u$ ,  $b_D$  la norme du vecteur de Burgers des dislocations de  $\frac{1}{2}a\langle 110 \rangle$ ,  $a^{su}$  la matrice d'interaction entre dislocations,  $\mu$  le module de cisaillement.

On distingue que,  $\tau_0$  est la contrainte de friction du réseau cristallin, qui dépend de la température et reste constante pour une température donnée, et  $\tau_\mu$  représente la contrainte athermique, qui décrit les interactions à longue distance dues à la présence des dislocations de forêt.

La loi d'évolution de la densité de dislocations retenue est sous la forme classique, avec un terme de multiplication et un terme d'annihilation, en ajoutant une matrice d'interaction  $b^{su}$  qui possède la même forme que la matrice  $a^{su}$  avec 6 coefficients indépendants, pour décrire l'interaction entre dislocations sur l'évolution de la densité de dislocations :

$$\dot{\rho}_D^s = \frac{1}{b_D} \left( \frac{\sqrt{\sum_u b^{su} \rho_D^u}}{\kappa} - g_c \rho_D^s \right) |\dot{\gamma}^s| \quad \text{Équation 2.9}$$

où  $\kappa$  est le facteur de proportionnalité qui compte le nombre des obstacles franchis par une dislocation avant son arrêt, et  $g_c$  est le facteur de proportionnalité qui dépend du mécanisme d'annihilation des dipôles de dislocations.

## 2.2.2 Pour les matériaux à l'état irradié

Les lois d'écroissage retenues pour les matériaux à l'état irradié sont basées sur l'évolution des densités de dislocations et de boucles de Frank (boucles de dislocations fautées de type interstitiel créées sous irradiation). Les dislocations et les boucles de Frank interviennent simultanément dans le durcissement du matériau. Selon l'étude bibliographique dans la **Section 1.4.3.3**, la cission critique s'exprime soit par la racine carrée de la somme de deux mécanismes durcissants par dislocations et par boucles de Frank, soit par la somme des racines carrées de ces deux mécanismes durcissants :

### a. Modèle « la racine de la somme »

$$\tau_c^s = \tau_0 + \sqrt{(\mu b_D)^2 \sum_u^{12} a^{su} \rho_D^u + (\alpha_L \mu b_L)^2 \sum_p^4 \phi_L \rho_L^p} \quad \text{Équation 2.10}$$

où  $b_L$  est la norme du vecteur de Burgers des boucles de Frank de  $\frac{1}{3}a\langle 111 \rangle$ ,  $\phi_L$  est le diamètre de boucles de Frank,  $\alpha_L$  est la force d'obstacle effective des boucles de Frank,  $p$  ( $p=1...4$ ) représente le numéro du plan de glissement présenté dans le **Tableau 1.11**,  $\rho_L^p$  est la densité de boucles de Frank sur le plan de glissement  $p$ .

D'une part, la loi d'évolution de la densité de dislocations du matériau à l'état irradié adopte la même forme que celle dans le cas du matériau à l'état non-irradié, en rajoutant un terme décrivant l'interaction entre dislocations et boucles de Frank qui intervient dans la multiplication des dislocations, dont le mécanisme a été présenté dans la **Section 1.3.1** :



$$\dot{\rho}_D^s = \frac{1}{b_D} \left( \frac{\sqrt{\sum_u b^{su} \rho_D^u + k_{dl} \sum_p \phi_L \rho_L^p}}{\kappa} - g_c \rho_D^s \right) |\dot{\gamma}^s| \quad \text{Équation 2.11}$$

avec  $k_{dl}$  le coefficient d'interaction effective entre dislocations et boucles de Frank.

D'autre part, aucun consensus n'existant dans la littérature sur la formulation de la loi d'évolution de la densité des boucles de Frank pour les aciers inoxydables austénitiques à l'état irradié, la loi d'évolution de la densité de boucles de Frank retenue adopte donc la forme de la loi développée par Krishna [Krishna et al. (2010) et Krishna et De (2011)] :

$$\dot{\rho}_L^p = -A \left( \sum_{s \in \text{plan}(p)} \rho_D^s \right) \frac{\phi_L}{b_D} (\rho_L^p - \rho_L^{sat}) \left( \sum_{s \in \text{plan}(p)} |\dot{\gamma}^s| \right) \quad \text{Équation 2.12}$$

où  $A$  est l'aire d'annihilation des boucles de Frank qui est suggérée constante pour simplifier le problème étudié, et  $\rho_L^{sat}$  est la densité stabilisée effective de boucles de Frank, avec  $\rho_L^{sat} \leq \rho_{Lini}^p$ . Comme présenté dans la **Section 1.2.3.6**, on considère que la densité de boucles dans les canaux est très faible (balayage de l'ordre de 100%), et le reste du matériau non-déformé contient 100% de boucles de Frank par irradiation. Par conséquent, on utilise ici  $\rho_L^{sat}$  pour représenter la densité effective de dislocations à la saturation dans le matériau étudié, après le processus du balayage des boucles de Frank lors du glissement des dislocations.

Notons que le balayage des boucles de Frank par les dislocations mobiles ne s'effectue que de façon « *in-plane* » (c'est-à-dire dans le plan de la boucle), par conséquent, les boucles dans le plan de glissement  $p$  ne peuvent qu'être défautées par les dislocations ayant glissé suivant les 3 systèmes de glissement  $s$  dans le même plan ( $s \in \text{plan}(p)$ ).

### b. Modèle « la somme des racines »

Ce modèle utilise les mêmes paramètres que ceux du modèle précédent, mais avec un raisonnement différent : les deux mécanismes sont entièrement séparés, sous forme additive :

$$\tau_c^s = \tau_0 + \mu b_D \sqrt{\sum_u a^{su} \rho_D^u} + \alpha_L \mu b_L \sqrt{\sum_p \phi_L \rho_L^p} \quad \text{Équation 2.13}$$

Cette fois-ci, en suggérant que les lignes de dislocation et les boucles de Frank défautées jouent respectivement un rôle dans la multiplication des dislocations, le libre parcours moyen total  $L_{tot}$  peut être considéré comme la moyenne harmonique des deux libres parcours  $L_D$  et  $L_L$ , comme suit :

$$\frac{1}{L_{tot}} = \frac{1}{L_D} + \frac{1}{L_L}, \text{ avec } L_D = \frac{\kappa_D}{\sqrt{\sum_u b^{su} \rho_D^u}} \text{ et } L_L = \frac{\kappa_L}{\sqrt{k_{dl} \sum_p \phi_L \rho_L^p}} \quad \text{Équation 2.14}$$

Notons que ce type de moyenne harmonique des libres parcours a été utilisé dans le travail de Monnet [Monnet (2009)] pour identifier différentes interactions entre dislocations. Après le défautement d'une boucle de Frank, la boucle parfaite créée est incorporée dans la ligne de dislocation passante (**Section 1.3.1**). Pour cette raison, les facteurs de proportionnalité  $\kappa_D$  et  $\kappa_L$  peuvent être égaux. La loi d'évolution de la densité de dislocations du matériau à l'état irradié s'exprime alors comme :

$$\dot{\rho}_D^s = \frac{1}{b_D} \left( \frac{\sqrt{\sum_u b^{su} \rho_D^u} + \sqrt{k_{dl} \sum_p \phi_L \rho_L^p}}{\kappa} - g_c \rho_D^s \right) |\dot{\gamma}^s| \quad \text{Équation 2.15}$$

Par ailleurs, la loi d'évolution de la densité de boucles de Frank adoptée garde exactement la même forme que celle présentée dans **Équation 2.12**.

En appliquant soit le modèle « racine de la somme » soit le modèle « somme des racines » pour un matériau à l'état irradié, si la densité (ou le diamètre moyen) de boucles de Frank vaut 0, on retrouve les équations d'un matériau non-irradié.

## 2.3 Implémentation numérique des lois cristallines dans le code de calcul ZéBuLoN

Avec les équations constitutives présentées précédemment, dans un premier temps, on souhaite implanter numériquement les lois cristallines en grandes déformations pour les matériaux non-irradié et irradié dans le code de calcul ZéBuLoN selon deux méthodes d'intégration des équations d'évolution :

- ✓ Intégration explicite : Méthode de Runge-Kutta d'ordre 2 à pas adaptatif
- ✓ Intégration implicite : Méthode de Newton

Avant tout, un changement des variables sur les densités de dislocations et de boucles de Frank a été réalisé, d'une part, pour obtenir des variables internes adimensionnelles, d'autre part, pour avoir les ordres de grandeur similaires par rapport aux autres variables internes du système  $\underline{E}$  et  $\gamma^s$ . Pour ce faire, on pose :

$$\begin{cases} r_D^s = b_D^2 \rho_D^s \\ r_L^p = b_L^2 \phi_L \rho_L^p \end{cases} \quad \text{Équation 2.16}$$

En les remplaçant dans les formules concernées, on obtient :

- pour les matériaux à l'état non-irradié (**Équation 2.8** et **Équation 2.9**) :

$$\tau_c^s = \tau_0 + \mu \sqrt{\sum_u a^{su} r_D^u} \quad \text{Équation 2.17}$$

$$\dot{r}_D^s = \left( \frac{\sqrt{\sum_u b^{su} r_D^u}}{\kappa} - G_c r_D^s \right) |\dot{\gamma}^s|, \text{ avec } G_c = \frac{g_c}{b_D} \quad \text{Équation 2.18}$$

- pour les matériaux à l'état irradié :

- Modèle « la racine de la somme » (Équation 2.10, Équation 2.11 et Équation 2.12) :

$$\tau_c^s = \tau_0 + \mu \sqrt{\sum_u a^{su} r_D^u + \alpha_L^2 \sum_p r_L^p} \quad \text{Équation 2.19}$$

$$\dot{r}_D^s = \left( \frac{\sqrt{\sum_u b^{su} r_D^u + K_{dl} \sum_p r_L^p}}{\kappa} - G_c r_D^s \right) |\dot{\gamma}^s|, \text{ avec } K_{dl} = k_{dl} \frac{b_D^2}{b_L^2} \text{ et } G_c = \frac{g_c}{b_D} \quad \text{Équation 2.20}$$

$$\dot{r}_L^p = -A_L \left( \sum_{s \in \text{plan}(p)} r_D^s \right) (r_L^p - r_L^{\text{sat}}) \left( \sum_{s \in \text{plan}(p)} |\dot{\gamma}^s| \right), \text{ avec } r_L^{\text{sat}} = b_L^2 \rho_L^{\text{sat}} \text{ et } A_L = A \frac{\phi_L}{b_D^3} \propto \phi_L \quad \text{Équation 2.21}$$

- Modèle « la racine de la somme » (Équation 2.13, Équation 2.15) :

$$\tau_c^s = \tau_0 + \mu \left( \sqrt{\sum_u a^{su} r_D^u} + \alpha_L \sqrt{\sum_p r_L^p} \right) \quad \text{Équation 2.22}$$

$$\dot{r}_D^s = \left( \frac{\sqrt{\sum_u b^{su} r_D^u} + \sqrt{K_{dl} \sum_p r_L^p}}{\kappa} - G_c r_D^s \right) |\dot{\gamma}^s|, \text{ avec } K_{dl} = k_{dl} \frac{b_D^2}{b_L^2} \text{ et } G_c = \frac{g_c}{b_D} \quad \text{Équation 2.23}$$

Les variables internes  $\{v_i\}$  à intégrer dans le cas d'un matériau non-irradié sont  $\underline{E}$ ,  $\gamma^s$  et  $r_D^s$  (*i.e.* au total, 33 composantes pour ces 3 variables internes) et dans le cas d'un matériau irradié sont  $\underline{E}$ ,  $\gamma^s$ ,  $r_D^s$  et  $r_L^p$  (*i.e.* au total, 37 composantes pour ces 4 variables internes). Les expressions de  $\dot{\gamma}^s$ , de  $\dot{r}_D^s$  et de  $\dot{r}_L^p$  sont déjà données ci-dessus dans la loi d'écoulement et dans les lois d'évolution de la densité de dislocations et de la densité de boucles de Frank.  $\underline{\dot{E}}$  peut être obtenue via sa définition, par :

$$\underline{\dot{F}} = \underline{E} \cdot \underline{\dot{P}} \Rightarrow \underline{\dot{F}} = \underline{\dot{E}} \cdot \underline{P} + \underline{E} \cdot \underline{\dot{P}} \Rightarrow \underline{\dot{E}} = (\underline{\dot{F}} - \underline{E} \cdot \underline{\dot{P}}) \cdot \underline{P}^{-1} = \underline{\dot{F}} \cdot \underline{F}^{-1} \cdot \underline{E} - \underline{E} \cdot \underline{L}^p \quad \text{Équation 2.24}$$

L'intégration d'une variable interne  $v_i$  à l'instant  $t$  et pendant un incrément de temps  $\Delta t$  permet de fournir des informations nécessaires à l'instant  $t + \Delta t$ . Dans la suite de ce chapitre, les calculs mathématiques seront toujours détaillés pour les matériaux à l'état irradié, afin de présenter la

problématique de façon générale. Le système d'équations différentielles à intégrer peut être établi par les 4 équations suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} \underline{\dot{E}} = \underline{\dot{F}} \cdot \underline{F}^{-1} \cdot \underline{E} - \underline{E} \cdot \left( \sum_s \Delta \gamma^s \underline{N}^s \right) \\ \dot{\gamma}^s = \left\langle \frac{|\tau^s| - \tau_c^s}{K_0} \right\rangle^n \text{sign}(\tau^s) = \Phi(|\tau^s| - \tau_c^s) \text{sign}(\tau^s) \\ \dot{r}_D^s = \left( \frac{\sqrt{\sum^u b^{su} r_D^u + K_{dl} \sum^p r_L^p}}{\kappa} - G_c r_D^s \right) |\dot{\gamma}^s| \text{ ou } \dot{r}_D^s = \left( \frac{\sqrt{\sum^u b^{su} r_D^u + K_{dl} \sum^p r_L^p}}{\kappa} - G_c r_D^s \right) |\dot{\gamma}^s| \\ \dot{r}_L^p = -A_L (r_L^p - r_L^{sat}) \left( \sum_{s \in \text{plan}(p)} |\dot{\gamma}^s| \right) \left( \sum_{s \in \text{plan}(p)} r_D^s \right) \end{array} \right.$$

Équation 2.25

avec une fonction de fluage définie par :  $\Phi(x) = \left\langle \frac{x}{K_0} \right\rangle^n$ , en posant  $x = |\tau^s| - \tau_c^s$ .

### 2.3.1 Méthode d'intégration explicite de Runge-Kutta

L'idée de cette méthode est d'estimer la valeur suivante ( $y_{t+\Delta t}$ ) par la somme de la valeur actuelle ( $y_t$ ) et du produit de la taille de l'intervalle ( $h$ ) par la pente estimée. Le schéma généralisé de la méthode de Runge-Kutta d'ordre  $s$  s'exprime sous la forme :  $y_{t+\Delta t} = y_t + \Delta t \sum_{i=1}^s b_i k_i$ .

Dans le code de calcul ZéBuLoN, la méthode de Runge-Kutta met en œuvre une intégration explicite d'ordre 2 à pas adaptatif avec un "*automatic time stepping*" pour contrôler la précision et redécouper localement les pas de temps. La méthode RK2 (Runge-Kutta d'ordre 2) donne 2 évaluations de l'ensemble des variables internes  $\{v_i\}$  pendant un incrément de temps  $[t, t+\Delta t]$ , ce qui permet de fournir un développement limité à l'ordre 2 :

$$\{v_i\}(t + \Delta t) = \{v_i\}(t) + \{\dot{v}_i\}(t) \Delta t + \{\ddot{v}_i\}(t) \frac{\Delta t^2}{2} + O(\Delta t^3) \quad \text{Équation 2.26}$$

L'implémentation de cette méthode d'intégration est relativement simple, car elle permet aux développeurs de ne fournir que la liste des équations différentielles sans se soucier d'entrer dans l'écriture et l'implémentation des dérivées partielles complexes. Cependant, l'intégration peut être gourmande en temps CPU. Il faut en général appliquer un grand nombre de pas pour limiter les erreurs. Dans le cadre de ma thèse, on utilise directement la routine RK sous ZéBuLoN pour réaliser les intégrations des variables internes.

### 2.3.2 Méthode d'intégration implicite de Newton

La méthode de Newton (théta méthode avec  $\theta = 1$ ) consiste à résoudre un système d'équations non-linéaires appelées résidus. Un schéma totalement implicite est utilisé en évaluant les variables internes  $\{\dot{v}_i\}$  à chaque fin d'incrément de temps  $t_{k+1}=t_k+\Delta t$ . Après la linéarisation du système d'équations, les résidus à annuler peuvent s'écrire :

$$\left\{ \begin{array}{l} R_{\underline{E}} = \Delta \underline{E} - \Delta \underline{F} \cdot \underline{F}^{-1} \cdot \underline{E} + \underline{E} \cdot \left( \sum_s \Delta \gamma^s \underline{N}^s \right) \\ R_{\gamma^s} = \Delta \gamma^s - \Phi(|\tau^s| - \tau_c^s) \text{sign}(\tau^s) \Delta t \\ R_{r_D^s}^{(a)} = \Delta r_D^s - |\Delta \gamma^s| \left( \frac{\sqrt{\sum_u b^{su} r_D^u + K_{dl} \sum_p r_L^p}}{\kappa} - G_c r_D^s \right) \text{ ou } R_{r_D^s}^{(b)} = \Delta r_D^s - |\Delta \gamma^s| \left( \frac{\sqrt{\sum_u b^{su} r_D^u + \sqrt{K_{dl} \sum_p r_L^p}}}{\kappa} - G_c r_D^s \right) \\ R_{r_L^p} = \Delta r_L^p + A_L (r_L^p - r_L^{sat}) \left( \sum_{s \in \text{plan}(p)} |\Delta \gamma^s| \right) \left( \sum_{s \in \text{plan}(p)} r_D^s \right) \end{array} \right.$$

Équation 2.27

Après avoir réalisé un développement limité à l'ordre 1 autour de la  $k^{\text{ième}}$  itération de la méthode de Newton, la linéarisation du système s'écrit :

$$\{R\} = \{R\}(\{\Delta v_i\})_k + \left[ \frac{\partial R}{\partial \{\Delta v_i\}} \right]_k \cdot (\{\Delta v_i\}_{k+1} - \{\Delta v_i\}_k) = \{0\} \quad \text{Équation 2.28}$$

Avec cette dernière, on peut établir les nouvelles valeurs des variables internes pour l'itération suivante :

$$\begin{pmatrix} \Delta \underline{E}_{k+1} \\ \Delta \gamma_{k+1}^s \\ \Delta r_{Dk+1}^s \\ \Delta r_{Lk+1}^p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Delta \underline{E}_k \\ \Delta \gamma_k^s \\ \Delta r_{Dk}^s \\ \Delta r_{Lk}^p \end{pmatrix} - \left( \begin{array}{cccc} \left[ \frac{\partial R_{\underline{E}}^k}{\partial \Delta \underline{E}} \right] & \left[ \frac{\partial R_{\underline{E}}^k}{\partial \Delta \gamma^u} \right] & \left[ \frac{\partial R_{\underline{E}}^k}{\partial \Delta r_D^u} \right] & \left[ \frac{\partial R_{\underline{E}}^k}{\partial \Delta r_L^q} \right] \\ \left[ \frac{\partial R_{\gamma^s}^k}{\partial \Delta \underline{E}} \right] & \left[ \frac{\partial R_{\gamma^s}^k}{\partial \Delta \gamma^u} \right] & \left[ \frac{\partial R_{\gamma^s}^k}{\partial \Delta r_D^u} \right] & \left[ \frac{\partial R_{\gamma^s}^k}{\partial \Delta r_L^q} \right] \\ \left[ \frac{\partial R_{r_D^s}^k}{\partial \Delta \underline{E}} \right] & \left[ \frac{\partial R_{r_D^s}^k}{\partial \Delta \gamma^u} \right] & \left[ \frac{\partial R_{r_D^s}^k}{\partial \Delta r_D^u} \right] & \left[ \frac{\partial R_{r_D^s}^k}{\partial \Delta r_L^q} \right] \\ \left[ \frac{\partial R_{r_L^p}^k}{\partial \Delta \underline{E}} \right] & \left[ \frac{\partial R_{r_L^p}^k}{\partial \Delta \gamma^u} \right] & \left[ \frac{\partial R_{r_L^p}^k}{\partial \Delta r_D^u} \right] & \left[ \frac{\partial R_{r_L^p}^k}{\partial \Delta r_L^q} \right] \end{array} \right)^{-1} \cdot \begin{pmatrix} R_{\underline{E}}^k \\ R_{\gamma^s}^k \\ R_{r_D^s}^k \\ R_{r_L^p}^k \end{pmatrix} \quad \text{Équation 2.29}$$

Finalement, toutes les variables internes  $\{v_i\}$  prises en fin d'incrément peuvent s'exprimer par :

$$\{v_i\}_{t+\Delta t} = \{v_i\}_t + \{\Delta v_i\}_{t+\Delta t}, \forall \{v_i\}_{t+\Delta t} \quad \text{Équation 2.30}$$

On rappelle que, pour un acier inoxydable austénitique de structure CFC, il existe 12 systèmes de glissement  $s$  distribués dans 4 plans de glissement  $p$ . A l'état irradié, la matrice jacobienne, dans laquelle des dérivées partielles de chaque résidu par rapport à toutes les variables  $\{v_i\}$  à intégrer compte une matrice carrée non-symétrique de  $37 \times 37$  (9 termes pour  $\underline{E}$ , 12 termes pour  $\gamma^s$ , 12 termes pour  $r_D^s$ , et 4 termes pour  $r_L^p$ ). Le détail des calculs des dérivées partielles des résidus est reporté dans l'**Annexe I. 3**.

### 2.3.3 Algorithmes pour les méthodes d'intégration explicite et implicite

Dans le cadre de ces travaux, on ne met en œuvre que les implémentations numériques des lois cristallines en grandes transformations. Ces lois cristallines ont été également implémentées en petites déformations dans le code de calcul ZéBuLoN, dont les détails ne seront pas présentés dans cette thèse. Afin d'expliquer les procédures de calcul, on précise ici les algorithmes principaux des intégrations locales pour la méthode de Runge-Kutta d'ordre 2 et pour la méthode de Newton aux pages suivantes (**Tableau 2.1**), en appliquant le formalisme présenté au-dessus, pour un incrément de temps passant de  $t$  à  $t+\Delta t$ .

Afin d'intégrer la loi de comportement, dans le cadre des grandes transformations, il est important de choisir une approximation cinématique au cours d'un pas de temps pour évaluer le tenseur vitesse de déformation  $\underline{D}$ . L'hypothèse faite dans notre modèle consiste à supposer que la vitesse des particules est constante au cours de l'incrément considéré. Ceci implique une variation similaire du gradient de déformation  $\underline{F}_\tau$  :

$$\underline{F}_\tau = \underline{F}_{t+\Delta t} - (1-\eta)\Delta \underline{F}, \text{ avec } \eta = \frac{\tau-t}{\Delta t}, \tau \in [t, t+\Delta t] \quad \text{Équation 2.31}$$

L'approximation du chemin linéaire à vitesse constante provoque une variation de volume. Pour résoudre ce problème, après l'étape de l'intégration, une correction  $\underline{E}_{t+\Delta t} = \left[ \frac{\det(\underline{F}_{t+\Delta t})}{\det(\underline{E}_{t+\Delta t})} \right]^{\frac{1}{3}} \underline{E}_{t+\Delta t}$  est nécessaire afin d'assurer qu'une incompressibilité plastique (sans variation de volume lors de la transformation plastique) est toujours garantie :  $\det(\underline{E}) = \det(\underline{F})$  et  $\det(\underline{P}) = 1$ .

(0) Vérification de l'incompressibilité plastique :  $\det(\underline{\underline{E}}) = \det(\underline{\underline{F}})$  et  $\det(\underline{\underline{P}}) = 1$

(a) Les entrées au début de l'incrément à l'instant  $t$  :  $\underline{\underline{F}}(t)$ ,  $\Delta \underline{\underline{F}}$  et  $\{v_i\}(t)$

(b) Tenseur de contrainte de Mandel :  $\underline{\underline{M}} = \underline{\underline{C}}^e \cdot (\underline{\underline{\Lambda}} : \underline{\underline{E}}_{GL}^e)$

(c) Cission résolue de chaque système de glissement :  $\tau^s = \underline{\underline{M}} : \underline{\underline{N}}^s = \underline{\underline{M}} : (\underline{\underline{m}}^s \otimes \underline{\underline{n}}^s)$

(d) Cission critique de chaque système de glissement :

(d1) pour le matériau à l'état non-irradié :  $\tau_c^s = \tau_0 + \mu \sqrt{\sum_u a^{su} r_D^u}$

(d2) pour le matériau à l'état irradié :

$$\tau_c^s = \tau_0 + \mu \sqrt{\sum_u a^{su} r_D^u + \alpha_L^2 \sum_p r_L^p} \quad \text{ou} \quad \tau_c^s = \tau_0 + \mu \sqrt{\sum_u a^{su} r_D^u} + \alpha_L \sqrt{\sum_p r_L^p}$$

(e) Vitesse de glissement de chaque système de glissement :  $\dot{\gamma}^s = \Phi(\tau^s, \tau_c^s)$

(f) Tenseur gradient du vecteur vitesse de glissement plastique :  $\underline{\underline{L}}^p = \sum_{s=1}^{12} \dot{\gamma}^s \underline{\underline{N}}^s$

(g) Intégrations locales des variables internes  $\{v_i\}$

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{\underline{\underline{E}}} = \dot{\underline{\underline{F}}} \cdot \underline{\underline{F}}^{-1} \cdot \underline{\underline{E}} - \underline{\underline{E}} \cdot \left( \sum_s \Delta \gamma^s \underline{\underline{N}}^s \right) \\ \dot{\gamma}^s = \left\langle \frac{|\tau^s| - \tau_c^s}{K_0} \right\rangle^n \text{sign}(\tau^s) = \Phi(|\tau^s| - \tau_c^s) \text{sign}(\tau^s) \\ \dot{r}_D^s = \left( \frac{\sqrt{\sum_u b^{su} r_D^u + K_{dl} \sum_p r_L^p}}{\kappa} - G_c r_D^s \right) |\dot{\gamma}^s| \quad \text{ou} \quad \dot{r}_D^s = \left( \frac{\sqrt{\sum_u b^{su} r_D^u} + \sqrt{K_{dl} \sum_p r_L^p}}{\kappa} - G_c r_D^s \right) |\dot{\gamma}^s| \\ \dot{r}_L^p = -A_L (r_L^p - r_L^{sat}) \left( \sum_{s \in \text{plan}(p)} |\dot{\gamma}^s| \right) \left( \sum_{s \in \text{plan}(p)} r_D^s \right) \end{array} \right.$$

(g1) par la méthode de Runge-Kutta d'ordre 2

(g2) par la méthode de Newton

(h) Normalisation du tenseur gradient de la transformation élastique (incompressibilité plastique) :

$$\underline{\underline{E}}_{t+\Delta t} = \left[ \frac{\det(\underline{\underline{F}}_{t+\Delta t})}{\det(\underline{\underline{E}}_{t+\Delta t})} \right]^{\frac{1}{3}} \underline{\underline{E}}_{t+\Delta t}$$

(i) Mise à jour du tenseur gradient de la transformation plastique :  $\underline{\underline{P}}_{t+\Delta t} = \underline{\underline{E}}_{t+\Delta t}^{-1} \cdot \underline{\underline{F}}_{t+\Delta t}$

(j) Mise à jour des sorties à la fin de l'incrément à l'instant  $t + \Delta t$  :  $\underline{\underline{\sigma}}(t + \Delta t)$ ,  $\{v_i\}(t + \Delta t)$

Tableau 2.1 : Algorithme de l'implémentation numérique des lois cristallines aux états non-irradié et irradié.

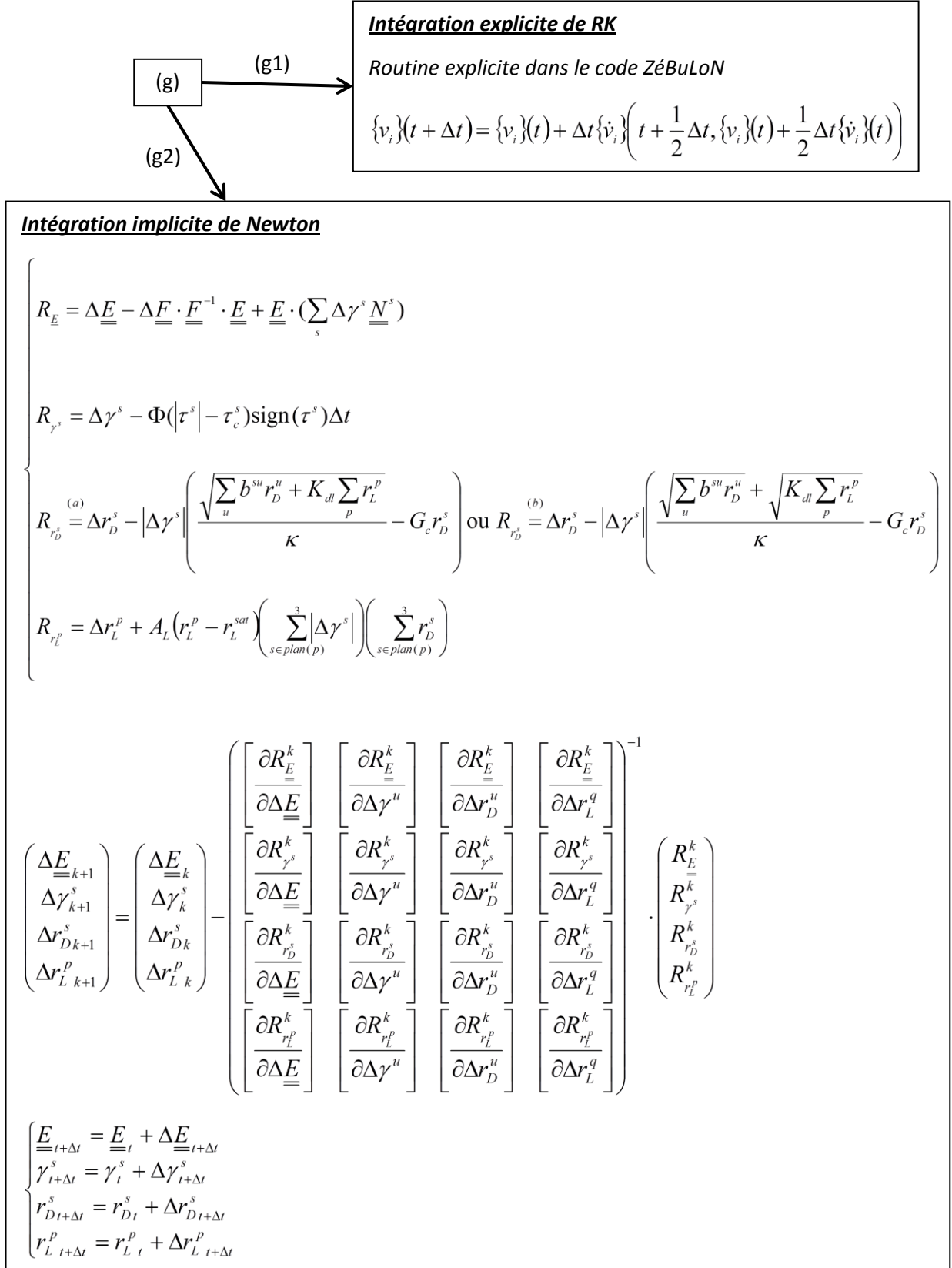


Tableau 2.1 (suite) : Les méthodes d'intégration local de RK2 et Newton.

Il est à remarquer que selon la littérature [Weber et Anand (1990)], un grand nombre d'algorithmes existants [Kalidindi et al. (1992), Anand et Kothari (1996), Ling et al. (2005), Vincent (2009) et Nguyen (2010)] sont développés en estimant le nouveau tenseur gradient de la transformation plastique à l'instant  $t + \Delta t$  par le schéma d'Euler implicite (Euler forward Scheme) :



$$\underline{\underline{P}}_{n+1} = \exp\{\Delta t \underline{\underline{L}}_{n+1}^p\} \underline{\underline{P}}_n = \exp\left\{\sum_s \Delta \gamma^s \underline{\underline{N}}^s\right\} \underline{\underline{P}}_n \approx \left\{\underline{\underline{1}} + \sum_s \Delta \gamma^s \underline{\underline{N}}^s\right\} \cdot \underline{\underline{P}}_n \quad \text{Équation 2.32}$$

Le tenseur gradient de la transformation élastique peut être soit ensuite calculé par  $\underline{\underline{E}}_{n+1} = \underline{\underline{F}}_{n+1} (\underline{\underline{P}}_{n+1})^{-1}$ , soit estimé directement via un tenseur « trial »  $\underline{\underline{E}}^* = \underline{\underline{F}}_{n+1} \cdot \underline{\underline{P}}_n^{-1}$  (ou dit d'essai) par :

$$\underline{\underline{E}}_{n+1} = \underline{\underline{E}}^* \exp\left\{-\Delta t \underline{\underline{L}}_{n+1}^p\right\} = (\underline{\underline{F}}_{n+1} \underline{\underline{P}}_n^{-1}) \exp\left\{-\sum_s \Delta \gamma^s \underline{\underline{N}}^s\right\} \approx (\underline{\underline{F}}_{n+1} \underline{\underline{P}}_n^{-1}) \cdot \left\{\underline{\underline{1}} - \sum_s \Delta \gamma^s \underline{\underline{N}}^s\right\} \quad \text{Équation 2.33}$$

Pour éviter le risque d'imprécision du calcul ou encore d'un problème théorique à cause des valeurs propres non réelles dans le calcul de l'exponentiel lorsque  $\underline{\underline{L}}^p$  est un tenseur non-symétrique, on a décidé de considérer  $\underline{\underline{E}}$  comme une variable interne libre à intégrer dans toute la suite de nos calculs numériques, sans proposer une estimation en utilisant la méthode présentée ci-dessus. Par contre, à titre de comparaison, une implémentation avec cette approximation a été faite et est présentée dans l'**Annexe I. 4**. D'ailleurs, une démarche appliquant le schéma d'Euler implicite a été réalisée dans le code de calcul Cast3M, qui sera présentée dans la section suivante, afin de faire une comparaison des résultats entre les deux codes de calcul.

Au cours de l'intégration locale, si l'intégration implicite échoue sur un point de Gauss (même après le découpage du temps), le calcul passe automatiquement à l'intégration explicite, afin de continuer le calcul, et la matrice tangente est évaluée par la méthode implicite en utilisant les incréments obtenus à partir de la méthode explicite.

### 2.3.4 Résolution globale

Pour obtenir une résolution du système d'équations au niveau global, qui régit la loi de comportement, les différentes matrices tangentes cohérentes pour la méthode d'intégration implicite adaptées à la formulation lagrangienne totale (Son développement a été présenté dans le rapport d'avancement de X. HAN [Han (2010)], non reproduite ici) et à la formulation lagrangienne réactualisée (**Annexe I. 5**) ont été développées. Concernant la méthode de type Runge-Kutta, il est possible d'utiliser des méthodes de perturbation pour évaluer la matrice tangente, ces méthodes peuvent cependant avoir un coût très important.

Sur la résolution itérative, comme la matrice tangente pour la formulation lagrangienne totale basée sur le premier tenseur de Piola-Kirchhoff (PK1) s'écrit d'une façon non-symétrique, un solveur non-symétrique doit être utilisé afin de résoudre le système linéaire. Par contre, avec la formulation lagrangienne réactualisée, il suffit d'utiliser un solveur symétrique, dont l'application est plus efficace. Dans la suite de la thèse, la matrice tangente cohérente dans la configuration réactualisée  $[C_{UL}]$  sera adoptée pour toutes les simulations numériques. Un organigramme simplifié est présenté dans la **Figure 2.2** :

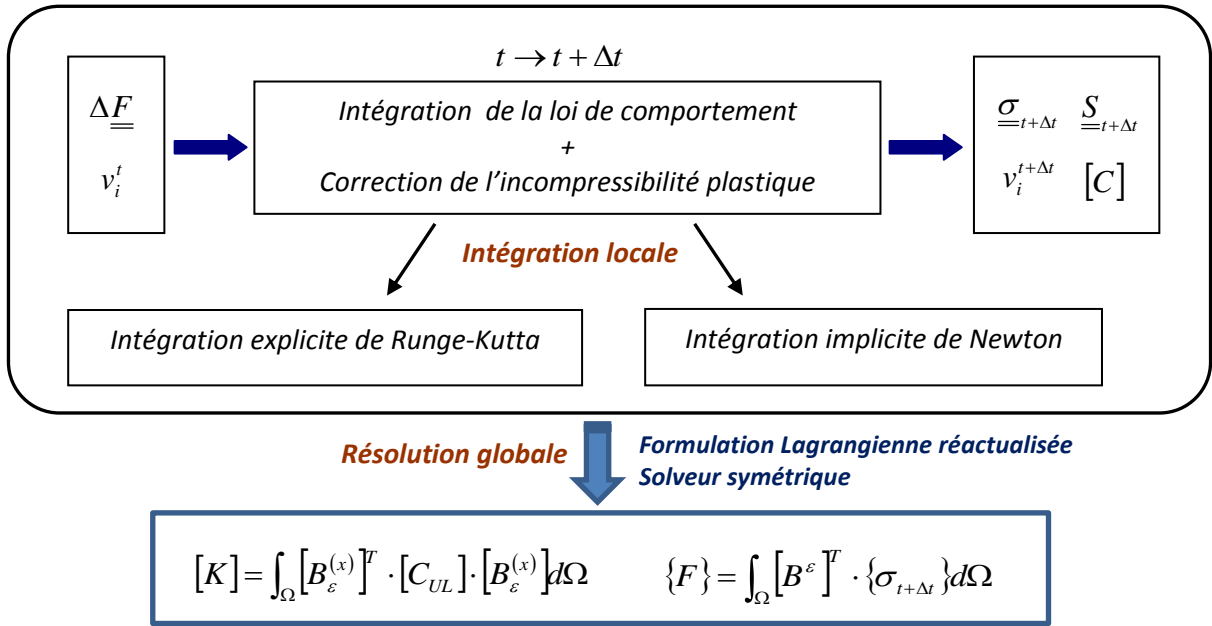


Figure 2.2 : Organigramme de l'implémentation numérique dans le code de calcul de ZéBuLoN.

## 2.4 Implémentation numérique des lois cristallines dans le code de calcul Cast3M

Basé sur les travaux de Vincent [Vincent (2009) et Vincent (2011)], dans lequel les implémentations d'une loi cristalline pour un matériau CC à l'état non-irradié avec les méthodes d'intégration de Runge-Kutta à pas adaptatif (RK2 ou RK4) et de Newton ont été réalisées dans le code de calcul Cast3M utilisé au sein du CEA, notre travail consiste à les modifier et élargir afin d'obtenir une loi cristalline implémentée dans Cast3M pour les matériaux CFC aux états non-irradié et irradié, avec ces deux méthodes d'intégration.

Afin de simplifier nos implémentations, en gardant les 3 variables internes identiques ( $\gamma^s, r_D^s$  et  $r_L^p$ ) à celles implantées dans ZéBuLoN, la variable interne  $\underline{E}$  a été remplacée par  $\underline{E}_{GL}^e$  (tenseur de la déformation élastique de Green-Lagrange). Cette modification permet d'appliquer le schéma d'Euler implicite et la notion du tenseur « trial » présenté précédemment [Anand et Kothari (1996)], qui a été implémenté dans le code Cast3M par L. Vincent [Vincent (2009) et Vincent (2011)]. Cette modification est également réalisée dans le code ZéBuLoN, les résultats obtenus montrent qu'il n'y a aucune influence sur le temps de calcul, ni sur l'exactitude de calcul, par rapport aux implémentations effectuées dans la **Section 2.3**.

En utilisant le schéma d'Euler implicite et la notion du tenseur trial, on obtient :

$$\underline{E}^* \approx \underline{E}_{n+1} \cdot \left( \underline{1} + \sum_s \Delta \gamma^s \underline{N}^s \right) \quad \text{Équation 2.34}$$

Pour passer à la déformation élastique de Green-Lagrange, on calcule tout d'abord le tenseur des dilatations élastiques Cauchy-Green droit  $\underline{\underline{C}}^e = \underline{\underline{E}}^T \cdot \underline{\underline{E}}$  comme suit :

$$\underline{\underline{E}}^{*T} \cdot \underline{\underline{E}}^* \approx \left( \underline{\underline{1}} + \sum_s \Delta\gamma^s \underline{\underline{N}}^s \right)^T \cdot \underline{\underline{E}}_{n+1}^T \cdot \underline{\underline{E}}_{n+1} \cdot \left( \underline{\underline{1}} + \sum_s \Delta\gamma^s \underline{\underline{N}}^s \right) \quad \text{Équation 2.35}$$

Le développement limité d'ordre 1 nous permet de donner :

$$\underline{\underline{C}}^{e*} = \underline{\underline{C}}_{n+1}^e + 2 \sum_s \Delta\gamma^s \left\{ \underline{\underline{C}}_{n+1}^e \cdot \underline{\underline{N}}^s \right\} \quad \text{Équation 2.36}$$

En passant au tenseur de la déformation élastique de Green-Lagrange, on obtient finalement :

$$\underline{\underline{E}}_{GL}^{e*} = \underline{\underline{E}}_{GL}^e + \sum_s \Delta\gamma^s \left\{ \underline{\underline{C}}^e \cdot \underline{\underline{N}}^s \right\} \quad \text{Équation 2.37}$$

où  $\{ \}$  signifie la partie symétrique du tenseur.

Comme les expressions des résidus des variables internes  $\gamma^s$ ,  $r_D^s$  et  $r_L^p$  ne présentent aucune différence par rapport à la démarche précédente, on peut établir les résidus à annuler :

$$\left\{ \begin{array}{l} R_{\underline{\underline{E}}_{GL}^e} = -\underline{\underline{E}}_{GL}^{e*} + \underline{\underline{E}}_{GL}^e + \sum_s \Delta\gamma^s \left\{ \underline{\underline{C}}^e \cdot \underline{\underline{N}}^s \right\}, \text{ avec } \underline{\underline{E}}_{GL}^e = {}^{n+1}\underline{\underline{E}}_{GL}^e = {}^n\underline{\underline{E}}_{GL}^e + \Delta\underline{\underline{E}}_{GL}^e \\ R_{\gamma^s} = \Delta\gamma^s - \Phi(|\tau^s| - \tau_c^s) \text{sign}(\tau^s) \Delta t \\ R_{r_D^s}^{(a)} = \Delta r_D^s - |\Delta\gamma^s| \left( \frac{\sqrt{\sum_u b^{su} r_D^u + K_{dl} \sum_p r_L^p}}{\kappa} - G_c r_D^s \right) \text{ ou } R_{r_D^s}^{(b)} = \Delta r_D^s - |\Delta\gamma^s| \left( \frac{\sqrt{\sum_u b^{su} r_D^u + \sqrt{K_{dl} \sum_p r_L^p}}}{\kappa} - G_c r_D^s \right) \\ R_{r_L^p} = \Delta r_L^p + A_L (r_L^p - r_L^{sat}) \left( \sum_{s \in \text{plan}(p)} |\Delta\gamma^s| \right) \left( \sum_{s \in \text{plan}(p)} r_D^s \right) \end{array} \right. \quad \text{Équation 2.38}$$

L'écriture des résidus nous permet de calculer leurs dérivées partielles par rapport aux variables internes, afin de construire une matrice jacobienne :

$$\left( \begin{array}{cccc} \left[ \frac{\partial R_{\underline{E}_{GL}}^k}{\partial \Delta \underline{E}_{GL}^e} \right] & \left[ \frac{\partial R_{\underline{E}_{GL}}^k}{\partial \Delta \gamma^u} \right] & \left[ \frac{\partial R_{\underline{E}_{GL}}^k}{\partial \Delta r_D^u} \right] & \left[ \frac{\partial R_{\underline{E}_{GL}}^k}{\partial \Delta r_L^q} \right] \\ \left[ \frac{\partial R_{\gamma^s}^k}{\partial \Delta \underline{E}_{GL}^e} \right] & \left[ \frac{\partial R_{\gamma^s}^k}{\partial \Delta \gamma^u} \right] & \left[ \frac{\partial R_{\gamma^s}^k}{\partial \Delta r_D^u} \right] & \left[ \frac{\partial R_{\gamma^s}^k}{\partial \Delta r_L^q} \right] \\ \left[ \frac{\partial R_{r_D^s}^k}{\partial \Delta \underline{E}_{GL}^e} \right] & \left[ \frac{\partial R_{r_D^s}^k}{\partial \Delta \gamma^u} \right] & \left[ \frac{\partial R_{r_D^s}^k}{\partial \Delta r_D^u} \right] & \left[ \frac{\partial R_{r_D^s}^k}{\partial \Delta r_L^q} \right] \\ \left[ \frac{\partial R_{r_L^p}^k}{\partial \Delta \underline{E}_{GL}^e} \right] & \left[ \frac{\partial R_{r_L^p}^k}{\partial \Delta \gamma^u} \right] & \left[ \frac{\partial R_{r_L^p}^k}{\partial \Delta r_D^u} \right] & \left[ \frac{\partial R_{r_L^p}^k}{\partial \Delta r_L^q} \right] \end{array} \right)$$

Le tenseur  $\underline{E}_{GL}^e$  est un tenseur symétrique. Par conséquent, pour chaque itération, il y a au total 34 variables à intégrer : 6 composants pour le tenseur  $\underline{E}_{GL}^e$ , 12 pour  $\gamma^s$ , 12 pour  $r_D^s$  et 4 pour  $r_L^p$ . On présente les détails de ces calculs dans l'**Annexe I. 6**. Les implémentations de la loi cristalline avec les méthodes d'intégration de Runge-Kutta et de Newton ont été réalisées au sein de l'Umat implicite. Dans le code de calcul Cast3M, à ce jour, il n'est pas possible de fournir une matrice tangente cohérente, car la matrice de rigidité élémentaire est évaluée au cours du temps via la matrice de rigidité élastique. Les variables servent à fournir la matrice tangente dans un appel classique à UMAT (*e.g.* dans le code Abaqus) ne sont pas utilisées dans le reste du code Cast3M.

## 2.5 Tests pour valider les implémentations numériques

Après avoir implémenté le modèle cristallin dans les codes de calcul ZéBuLoN et Cast3M, afin de nous assurer que le formalisme en grandes transformations pour les matériaux CFC et les implantations pour les deux méthodes d'intégration sont correctes, une série de tests sur un monocristal ont été effectués. Avant tout, les constantes d'élasticité ont été analytiquement calculées et numériquement validées sous ZéBuLoN. Puis une vérification des systèmes de glissement activés et des facteurs de Schmid est réalisée. Pour finir, on compare les résultats obtenus par ces deux méthodes d'intégration dans les deux codes de calcul, selon les tests de traction simple et un test de glissement simple, afin de valider les implémentations numériques.

### 2.5.1 Elasticité cristalline

Le cristal de fer austénitique (fer- $\gamma$ ) présente une forte anisotropie élastique dans la réalité [Huntington, 1958]. Sur le comportement mécanique macroscopique du matériau, l'effet de l'élasticité anisotrope est souvent négligé. Cependant, pour étudier la rupture ductile du monocristal, il est intéressant d'ajouter l'élasticité anisotrope dans le modèle à l'échelle cristalline, afin d'obtenir des résultats plus précis. Une estimation autocohérente inverse est appliquée pour calculer analytiquement les constantes d'élasticité, ensuite ces valeurs sont vérifiées et validées par les simulations numériques sur un agrégat polycristallin.

**2.5.1.1 Calcul analytique des constantes d'élasticité**

**Hypothèses :**

- Agrégat polycristallin avec un désordre parfait au sens de Kröner [Kröner (1986)] ;
- Les aciers austénitiques inoxydables (304/316) comportent une seule phase d'austénite  $\gamma$ . La petite quantité de ferrite  $\alpha$  est négligée ;
- Elasticité cubique à l'échelle monocristalline ;
- Influence de la température sur le facteur d'anisotropie élastique négligeable.

Avec les hypothèses ci-dessus, il est possible de remonter au calcul des modules d'élasticité du monocristal qu'on connaît mal entre 280°C et 380°C, à partir du comportement élastique macroscopique supposé isotrope. Selon les données dans la littérature d'EPRI [Tang (2004)], le module d'Young  $E$  et le coefficient de Poisson  $\nu$  pour les aciers austénitiques inoxydables de la série 300 peuvent être calculés à partir des relations présentées dans le **Tableau 2.2**. Pour les tests à 330°C, on obtient  $E \approx 173\text{GPa}$  et  $\nu \approx 0.316$ .

<b>Module d'Young</b>	$E = f(T \text{ en } ^\circ\text{C})$	$200379.5 - 81.221 * T$
<b>Coefficient de Poisson</b>	$\nu = f(T \text{ en } ^\circ\text{C})$	$0.2921 + 0.00007169 * T$
<b>Module de cisaillement</b>	$\mu = f(E, \nu)$	$\frac{E}{2(1+\nu)}$

Tableau 2.2 : les expressions des module d'Young, coefficient de Poisson et module de cisaillement en fonction de la température [Tang (2004)].

En utilisant les relations  $k = \frac{E}{3(1-2\nu)}$  et  $\mu = \frac{E}{2(1+\nu)}$ , on peut obtenir respectivement le module d'élasticité hydrostatique (ou de compressibilité) et le module de cisaillement à l'échelle macroscopique, pour un polycristal isotrope :

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{k} \approx 157\text{GPa} \\ \tilde{\mu} \approx 66\text{GPa} \end{array} \right.$$

Pour un polycristal formé de grains de structure cubique, le comportement élastique est défini par :

$$\mathbf{C} = 3k\mathbf{J} + 2\mu^a\mathbf{K}_a + 2\mu^b\mathbf{K}_b$$

avec  $\mathbf{K}_a = \mathbf{\Lambda} - \mathbf{J}$ ,  $\mathbf{K}_b = \mathbf{I} - \mathbf{\Lambda}$  et  $\mathbf{\Lambda} = e_1 \otimes e_1 \otimes e_1 \otimes e_1 + e_2 \otimes e_2 \otimes e_2 \otimes e_2 + e_3 \otimes e_3 \otimes e_3 \otimes e_3$  dans une base orthonormée  $(e_1, e_2, e_3)$ . Le polycristal étant isotrope son comportement effectif se réduit à  $\tilde{\mathbf{C}} = 3\tilde{k}\mathbf{J} + 2\tilde{\mu}\mathbf{K}$ . L'estimation autocohérente correspondant à un milieu  $\mathbf{C}^0$  dont le comportement est celui du milieu homogène équivalent. En prenant en compte la compressibilité des cristaux, on peut obtenir une équation pour l'estimation autocohérente du module de cisaillement [Bornert et al. (2001)] :

$$8(\mu^{AC})^3 + (9k + 4\mu^a)(\mu^{AC})^2 - 3\mu^b(k + 4\mu^a)\mu^{AC} - 6k\mu^a\mu^b = 0 \quad \text{Équation 2.39}$$

Ici, le module de compressibilité est déterminé exactement par  $k = \tilde{k}$ . On suppose que le module de cisaillement par l'approche autocohérente  $\mu^{AC}$  est une bonne estimation du module de cisaillement macroscopique  $\tilde{\mu}$ .

Puisque une élasticité cubique peut être utilisée pour les matériaux CFC, le tenseur d'élasticité d'ordre 4 en notation de Voigt-Kelvin dans le repère du monocristal s'écrit par :

$$\underline{\underline{\Lambda}} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & & & \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & & & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & & & \\ & & & C_{44} & & \\ & 0 & & & C_{44} & \\ & & & & & C_{44} \end{bmatrix}$$

Les relations qui lient les coefficients à déterminer  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  et  $C_{44}$  avec les modules d'élasticité du cristal peuvent s'exprimer par :

$$\begin{cases} C_{11} = \frac{3k + 4\mu_a}{3} \\ C_{12} = \frac{3k - 2\mu_a}{3} \\ C_{44} = \mu_b \end{cases}$$

Avec ces relations, l'estimation autocohérente du module de cisaillement [Hill (1965)] peut s'exprimer comme :

$$8(\mu^{AC})^3 + (5C_{11} + 4C_{12})(\mu^{AC})^2 - C_{44}(7C_{11} - 4C_{12})\mu^{AC} - C_{44}(C_{11} - C_{12})(C_{11} + 2C_{12}) = 0$$

On considère que le facteur d'anisotropie élastique pour les aciers austénitiques de série 300 est le même pour le fer- $\gamma$  à température ambiante [Sauzay (2007)], qui est donné par :

$$a = \frac{\mu^b}{\mu^a} = \frac{2C_{44}}{C_{11} - C_{12}} = 3.36$$

On obtient finalement les constantes d'élasticité :

$C_{11}$ (GPa)	$C_{12}$ (GPa)	$C_{44}$ (GPa)
198.6	136.2	104.7

### 2.5.1.2 Validation par la simulation numérique par éléments finis

En s'inspirant des données issues de [Ledbetter, 1981], pour les aciers inoxydables 316, le facteur d'anisotropie élastique est relativement constant :  $\alpha=3.51\pm 0.19$ . De plus, un autre coefficient  $y = C_{12}/C_{11}$  est aussi relativement constant :  $y = 0.642 \pm 0.037$ . Selon notre calcul analytique présenté ci-dessus, les résultats obtenus sont en accord avec les valeurs données dans ce rapport.

Afin de valider numériquement les coefficients d'élasticité obtenus, les tests sur un agrégat polycristallin avec des grains élémentaires cubiques ont été réalisés. L'agrégat contient 8000 grains (20x20x20) avec les éléments c3d20 (**Figure 2.3**). Les orientations cristallines sont obtenues à partir de tirages aléatoires des angles d'Euler ( $\phi_1, \Phi, \phi_2$ ). Une formulation en petite déformation et un comportement élastique linéaire du matériau sont appliqués. Les conditions aux limites KUBC (déformation imposée) et SUBC (contrainte imposée) sont utilisées respectivement. Les résultats déterminés sont présentés dans le **Tableau 2.3**.

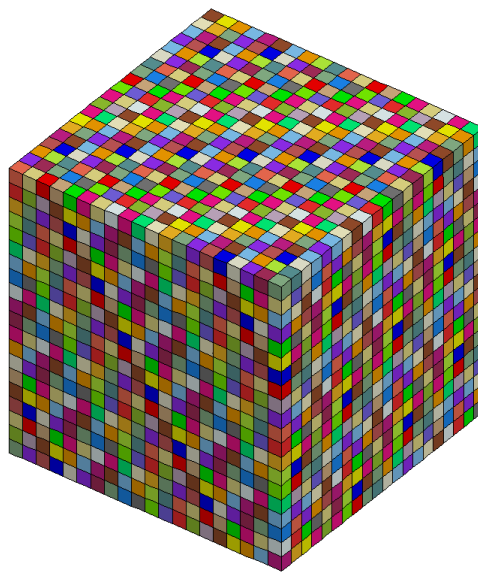


Figure 2.3 : Agrégat polycristallin constitué de 8000 grains élémentaires cubiques, avec les orientations cristallines aléatoires.

		<b>KUBC</b>	<b>SUBC</b>
<b>Tirage 1</b>	$\kappa$ (GPa)	157	157
	$\mu$ (GPa)	69.0	67.1
<b>Tirage 2</b>	$\kappa$ (GPa)	157	157
	$\mu$ (GPa)	68.4	66.7

Tableau 2.3 : Module de compressibilité et module de cisaillement calculés avec les conditions aux limites en contrainte homogène au contour (SUBC) ou en déformation homogène au contour (KUBC), pour 2 tirages des orientations cristallines aléatoires.

Les modules de cisaillement effectifs obtenus sont très proches de la valeur utilisée dans l'estimation autocohérente ( $\tilde{\kappa} = 157\text{GPa}$  et  $\tilde{\mu} = 66\text{GPa}$ ). Par conséquent, l'hypothèse de la validité de l'estimation autocohérente est vérifiée. Dans tout ce qui suivra, sauf indication contraire, les coefficients d'élasticité calculés ci-dessus vont être utilisés.

### 2.5.2 Tests simples pour les matériaux non-irradié et irradié sous ZÉBuLoN

Cinq orientations cristallographiques représentatives ( $[001]$ ,  $[111]$ ,  $[011]$ ,  $[012]$  et  $[\bar{1}25]$ ) sont choisies à l'aide de la projection stéréographique faisant apparaître les systèmes de glissement, selon la convention de Schmid-Boas (**Figure 2.4**), afin de vérifier théoriquement les différentes conditions d'activation (glissement simple, glissement double et glissement multiple).

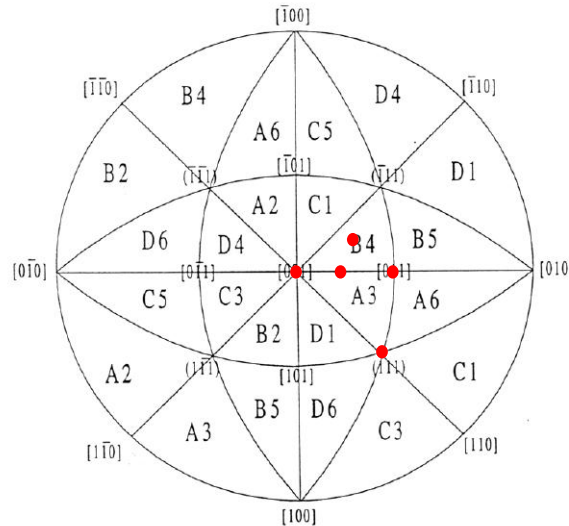


Figure 2.4 : 5 points de tests de traction simple présentés sur la projection stéréographique selon la convention de Schmid-Boas.

Les simulations de traction simple et de glissement simple (pour éviter l'ambiguïté, ici le glissement simple est un essai, dont la cinématique est  $u_i = (F_{ij} - \delta_{ij})x_j$ , avec  $\underline{\underline{F}} = \begin{pmatrix} 1 & \gamma & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ . Cette

terminologie ne concerne pas l'activation d'un seul système de glissement) sont réalisés sur un élément fini cubique c3d8 (élément en 3 dimensions avec 8 nœuds et 8 points de Gauss) à interpolation linéaire du champ de déplacement de dimension  $(1 \times 1 \times 1) \text{ mm}^3$  (**Figure 2.5**). Toutes les conditions d'essais et les paramètres utilisés (pas encore identifiés) sont précisés dans le **Tableau 2.4** et le **Tableau 2.5**.

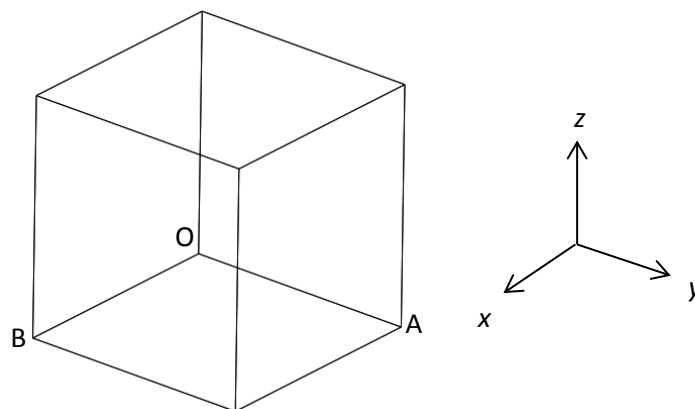


Figure 2.5 : Un élément fini cubique pour les tests de traction et de glissement simple.



Au niveau de la loi de comportement, suite à la recherche bibliographique selon [Krishna et al. (2010) et Krishna et De (2011)] sur les lois de comportement des matériaux irradiés de structures CFC et CC à l'échelle cristalline, le modèle « la racine de la somme » est appliqué. Ce modèle sera prioritairement utilisé pour identifier les paramètres du modèle dans la suite de la thèse. On note ici que  $b_D$  et  $b_L$  sont respectivement les vecteurs de Burgers qui valent 2.54Å et 2.08Å selon la littérature [Pokor (2004b)], les paramètres de Norton sont choisis afin d'obtenir une faible viscosité, la densité initiale de dislocations  $\rho_{Dini}$  (resp. de boucles de Frank  $\rho_{Lini}$ ) sont données par système de glissement (resp. par plan de glissement) en supposant que les dislocations (resp. les boucles de Frank) soient uniformément distribuées dans le matériau, la matrice d'interaction  $a^{su}$  utilise les valeurs présentées dans le **Tableau 1.15**, et la matrice d'interaction  $b^{su}$  prend une forme simplifiée avec  $b=0$  si  $s=u$  et  $b=1$  sinon, pour retrouver la formule utilisée dans [Hoc et Forest (2001)]. Les paramètres de Norton ont été choisis afin d'avoir une très faible dépendance de la vitesse, pour évaluer la performance des implémentations numériques. Les conditions aux limites sont construites selon la direction de traction. Les maillages initiaux et déformés sont reportés dans l'**Annexe I. 7**.

Orientation cristalline	Tractions simples					Glissement simple
	X3 [001] X1 [100]	X3 [111] X1 [011]	X3 [011] X1 [011]	X3 [012] X1 [100]	X3 [125] X1 [210]	X3 [001] X1 [100]
Chargement	Déplacement imposé selon X3 à la face {z=1}					Déplacement imposé selon X1 à la face {z=1}
Conditions aux limites	{z=0} : Uz=0 ; {y=0} : Uy=0 ; {x=0} : Ux=0 ; {x=1} : mpc suivant Ux ; {y=1} : mpc suivant Uy		{z=0} : Uz=0 ; {x=0} : Ux=0 ; O : Uy=0		{z=0} : Uz=0 ; O : Ux=Uy=0 ; A : Uy=0	{z=1} : Uy=Uz=0 ; {z=0} : Ux=Uy=Uz=0
Déformation	Déformation à 20% avec une vitesse de déformation de $10^{-3} s^{-1}$					400%

Tableau 2.4 : Les tests simples réalisés pour les simulations de traction et de glissement simple sur un élément fini. *mpc* : « Multi-Point Constraint » – les degrés de liberté d'un groupe de nœuds sont égales suivant une direction donnée.

$C_{11}$ (GPa)	$C_{12}$ (GPa)	$C_{44}$ (GPa)	$\mu$ (GPa)	$n$	$K_0$ (MPa.s <sup>1/n</sup> )
198.6	136.2	104.7	65.6	15	1
$\tau_0$ (MPa)	$G_c$	$\kappa$	$b_D$ (Å)	$b_L$ (Å)	$\rho_{Dini}^s$ (m <sup>-2</sup> )
5	10	40	2.54	2.08	1 e12
$\rho_{Lini}^p$ (m <sup>-3</sup> )	$\phi_L$ (m)	$\alpha_L$	$A_L$	$\rho_L^{sat}$ (m <sup>-3</sup> )	$K_{dl}$
1 e23	2.3 e-9	0.35	1 e8	0.5 e23	1 e-5
$a_1$	$a_2$	$a_3$	$a_4$	$a_5$	$a_6$
0.124	0.124	0.07	0.625	0.137	0.122
$b_1$	$b_2$	$b_3$	$b_4$	$b_5$	$b_6$
0	1	1	1	1	1

Tableau 2.5 : Liste des paramètres matériaux pour la simulation numérique sur un élément fini (état non-irradié).

### 2.5.2.1 Vérification de la loi de Schmid via les tests de traction simple

Au début du test, les cissions résolues initiales pour tous les systèmes de glissement sont les mêmes, ceci implique que le système qui possède le facteur de Schmid le plus grand est activé en premier. Les résultats des tests de traction sont présentés dans le **Tableau 2.6**.

Les activations des systèmes de glissement primaires sont cohérentes avec leurs positions sur la projection stéréographique. L'activation du système de glissement secondaire pour une traction suivant  $[\bar{1}25]$  a été vérifiée dans les thèses de Tabourot et de Saai [Tabourot (1992) et Saai (2007)]. Les facteurs de Schmid sont vérifiés graphiquement en calculant le rapport  $\sigma/\tau_{activée}^s$ .

Direction de traction (X3)	[001]	[111]	[011]	[012]	$[\bar{1}25]$
Nombre de systèmes activés	8	6	4	2	1
Noms des systèmes activés	B4, B2, D4, D1, A2, A3, C3, C1	D1, D6, A6, A3, C3, C1	B4, B5, A6, A3	B4, A3	B4
Système de glissement secondaire	-	-	-	-	C1
Facteur de Schmid des systèmes activés	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	$\frac{2}{3\sqrt{6}}$	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	$\frac{\sqrt{6}}{5}$	$\frac{\sqrt{6}}{5}$

Tableau 2.6 : Les systèmes de glissement activés et les facteurs de Schmid pour les tests de traction simple.

### 2.5.2.2 Glissement simple sans écoulement

Après avoir vérifié la loi de Schmid en faisant les tests de traction simple, on souhaite vérifier les modèles explicite et implicite par un test de glissement simple quand aucun écoulement n'est introduit, avec une matrice d'interaction isotrope  $a_1 = a_2 = a_3 = a_4 = a_5 = a_6 = 1$ . La **Figure 2.6** présente la réponse du monocristal, lors d'un glissement simple. En comparant avec les courbes montrées dans [Besson et al. (2001)], on trouve la même forme de comportement périodique. Au cours d'une rotation sans fin du réseau cristallin, certains systèmes de glissement sont successivement activés, désactivés et réactivés. Cependant, le nombre total des systèmes de glissement actifs reste toujours égal à 8. Avec les méthodes d'intégration explicite et implicite, les courbes montrent une parfaite cohérence (**Figure 2.6**).

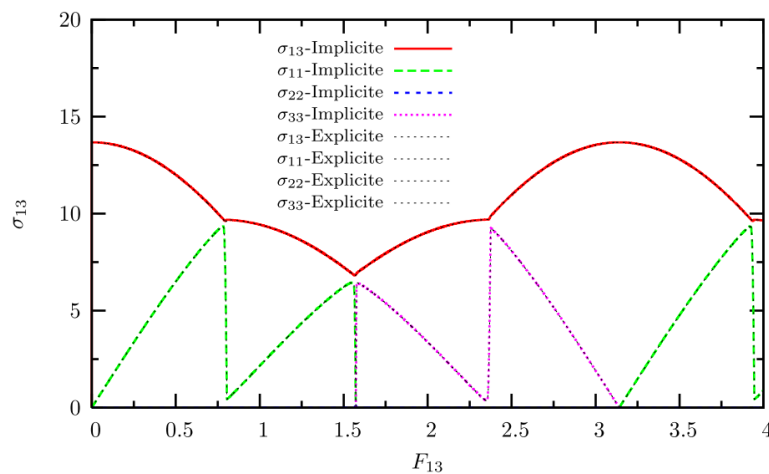


Figure 2.6 : Les courbes de contrainte de glissement en fonction de la déformation pour le test de glissement simple, avec les 2 méthodes d'intégration.

### 2.5.2.3 Comparaison des résultats obtenus par les deux méthodes d'intégration

Avant de comparer les deux méthodes d'intégration, on décide de choisir le tenseur de contrainte de Mandel  $\underline{M}$  (par rapport au tenseur de contrainte PK2  $\underline{\Pi}^e$  qui est défini dans l'Équation 2.4), du fait de sa précision, pour calculer la cission résolue  $\tau^s$ . On note que ce choix est valable pour tous les calculs numériques concernés dans ce rapport. Les calculs en utilisant les tenseurs de Mandel et de PK2 en explicite et en implicite ont été réalisés pour tous les tests de traction simple et de glissement simple. Les résultats montrent que l'erreur absolue est toujours inférieure à 0.3%. De plus, l'utilisation de l'un ou l'autre de ces deux tenseurs ne pose pas de problème sur l'activation et la désactivation des systèmes de glissement.

Tous les paramètres de calcul pour les deux méthodes d'intégration sont choisis identiques pour pouvoir comparer la précision et la performance de ces deux méthodes. Les critères de convergence sont donnés dans le **Tableau 2.7**.

<i>*Integration runge_kutta</i>	$10^{-5}$		
<i>*Integration theta_method_a</i>	$\theta=1$	$10^{-12}$	$max\_iteration=250$

Tableau 2.7 : Les critères de convergence pour la méthode explicite RK2 et pour la méthode implicite de Newton (théta méthode).

Les résultats de ces simulations sont assez remarquables. Avec la méthode d'intégration implicite, les courbes de traction obtenues pour les états non-irradié et irradié suivant  $[001]$ ,  $[111]$ ,  $[011]$ ,  $[012]$  et  $[\bar{1}25]$  sont illustrées respectivement sur les **Figure 2.7(a)** et **(b)**. Leurs systèmes activés et les facteurs de Schmid (**Tableau 2.6**) correspondent bien aux calculs analytiques. De plus, les résultats obtenus pour les directions de traction  $[011]$ ,  $[012]$  et  $[\bar{1}25]$  avec la méthode explicite ont été également présentés sur ces figures, ils montrent de très bonnes cohérences avec ceux obtenus par la méthode implicite. Il est à noter que dans le cas où la direction de traction suit l'orientation cristallographique  $[\bar{1}25]$ , un seul système (*i.e.* système primaire) est initialement activé. Suite à une rotation du réseau cristallin, un autre système (*i.e.* système secondaire) est également activé. Le changement du nombre de systèmes activés provoque un point angulaire (non-dérivable) de la courbe de traction en ce point-là.

Par contre, avec la méthode d'intégration explicite (et parfois avec la méthode d'intégration implicite), pour les tests de traction simple avec un "grand" nombre de systèmes de glissements activés (*i.e.* 8 pour  $[001]$  et 6 pour  $[111]$ ), une instabilité numérique apparaît lors de ces calculs (**Figure 2.8(a)** et **(b)**). Cette instabilité de calcul provoque une bifurcation de glissements plastiques, qui peut se traduire par un glissement ayant lieu préférentiellement suivant un système de glissement activé par rapport à l'autre (initialement activé) situé dans le même plan de glissement (**Figure 2.9(a)** et **Figure 2.10(a)**). Par conséquent, la moitié de systèmes activés se désactivent simultanément (*i.e.* 4 au lieu de 8 pour  $[001]$  et 3 au lieu de 6 pour  $[111]$ ), et l'autre moitié glisse plus rapidement pour atteindre le bon niveau du glissement plastique cumulé. La bifurcation des glissements plastiques provoque également une bifurcation de densités de dislocations correspondante (**Figure 2.9(b)** et **Figure 2.10(b)**). Le phénomène de bifurcation numérique a été également constaté dans les modèles cristallins implémentés dans les codes de calcul Cast3M (qui sera présenté dans la section suivante) et Code Aster [Rupin et al. (2011)].

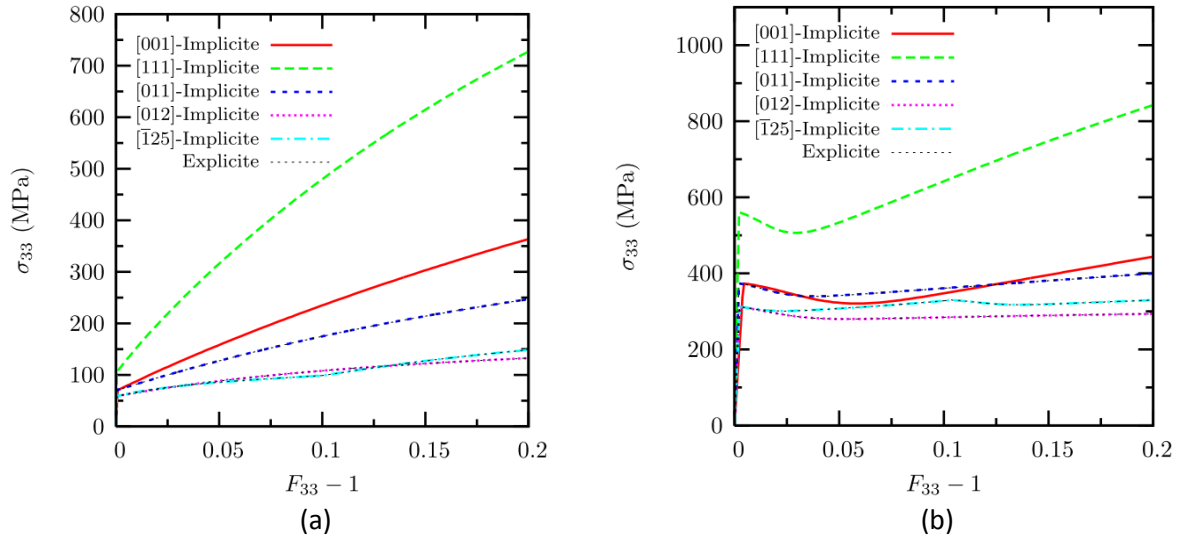


Figure 2.7 : L'évolution de la contrainte vraie en fonction de la déformation conventionnelle pour les tests de traction simple suivant différentes orientations cristallographiques. Les résultats obtenus par la méthode d'intégration implicite sont présentés en couleur et ceux obtenus par la méthode d'intégration explicite sont présentés par traits noirs fins en pointillé. (a) Etat non-irradié, (b) état irradié.

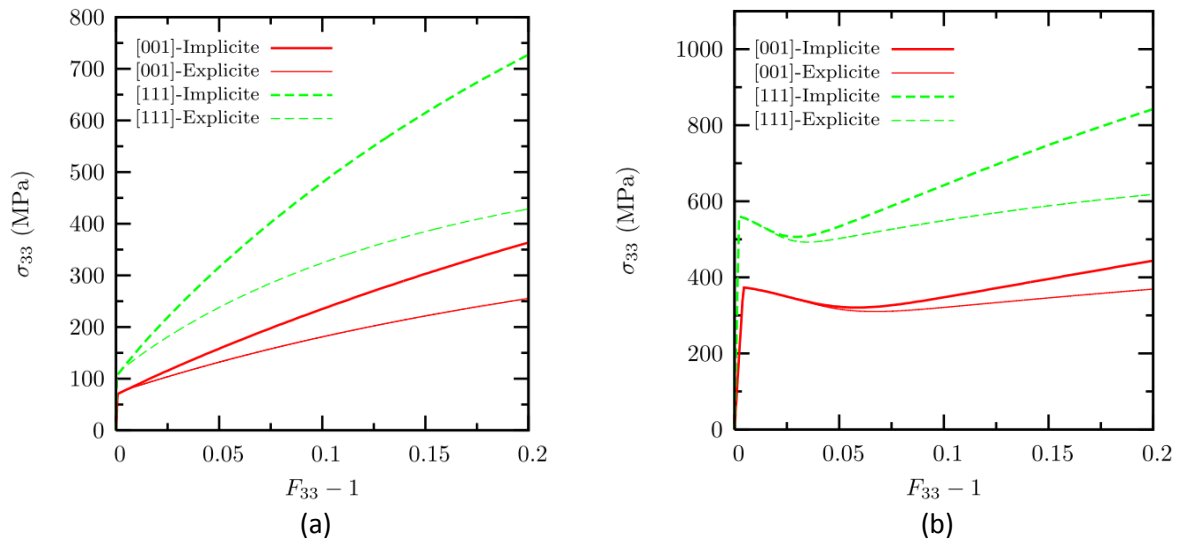


Figure 2.8 : L'évolution de la contrainte vraie en fonction de la déformation conventionnelle pour les tests de traction simple pour les directions de traction [001] et [111], avec les méthodes d'intégration explicite et implicite. (a) Etat non-irradié, (b) état irradié.

Ce type d'instabilité numérique a été remarqué et discuté dans [Forest (1998)], en faisant une analyse de la bifurcation en fonction des coefficients de l'écroissage latent. D'après une analyse numérique avec notre modèle, on remarque que ce résultat dépend de la matrice d'interaction  $a^{su}$  et de la viscosité introduites dans la loi d'écoulement. Pour une matrice d'interaction supposée isotrope (e.g.  $a_1=a_2=a_3=a_4=a_5=a_6=a$ ) ou dans le cas où les coefficients de l'écroissage latent sont identiques et inférieurs au coefficient de l'auto-écroissage (e.g.  $(a_2=a_3=a_4=a_5=a_6=a_{Latent}) < (a_1=a_{auto})$ ), l'instabilité de calcul disparaît quelle que soit la viscosité. Dans tous les autres cas, pour un modèle plastique ou très peu viscoplastique, on peut constater un phénomène d'instabilité numérique due à l'accumulation des erreurs lors de calculs numériques. Si on maintient la matrice d'interaction identifiée à partir de la DDD ( $a_1=0.124$ ,  $a_2=0.124$ ,  $a_3=0.07$ ,  $a_4=0.625$ ,  $a_5=0.137$ ,  $a_6=0.122$ ), le phénomène de bifurcation se stabilise et tend à disparaître tant qu'on augmente progressivement le paramètre de Norton  $K_0$ . La cause est relativement simple : lorsque la sensibilité à la vitesse du modèle augmente, l'écoulement

viscoplastique peut "franchir" plus facilement la frontière du domaine d'élasticité initial, ce qui permet de réduire, même d'éliminer le problème de l'instabilité lors de la compétition entre différents systèmes de glissement activés. Sur les **Figure 2.11(a)** et **(b)**, on montre la contrainte de traction rationnelle en fonction de la déformation conventionnelle, pour différentes matrices d'interaction  $a^{su}$  et paramètres de Norton  $K_0$ . Des calculs supplémentaires suivant la direction de traction [001] ont été réalisés sur un petit agrégat monocristallin qui possède 27 (3x3x3) éléments finis cubiques c3d20r (élément quadratique réduit). Les mêmes chargements et conditions aux limites ont été appliqués. Une bifurcation numérique a été observée avec la méthode explicite, ainsi qu'avec la méthode implicite. Ce phénomène peut être également amélioré en utilisant les moyens décrits ci-dessus (**Figure 2.12**).

Après avoir identifié le phénomène de bifurcation numérique, avec notre modèle pour les matériaux à l'état irradié, on peut également observer un durcissement suivi par un adoucissement pour chaque orientation cristallographique (**Figure 2.7(b)** et **Figure 2.8(b)**). A la suite de l'adoucissement, un durcissement est observé, car la stabilisation de la densité de boucles de Frank est stabilisée (à  $\rho_L^{sat}$ ) (**Figure 2.10(c)**) et la densité de dislocations augmente de façon continue.

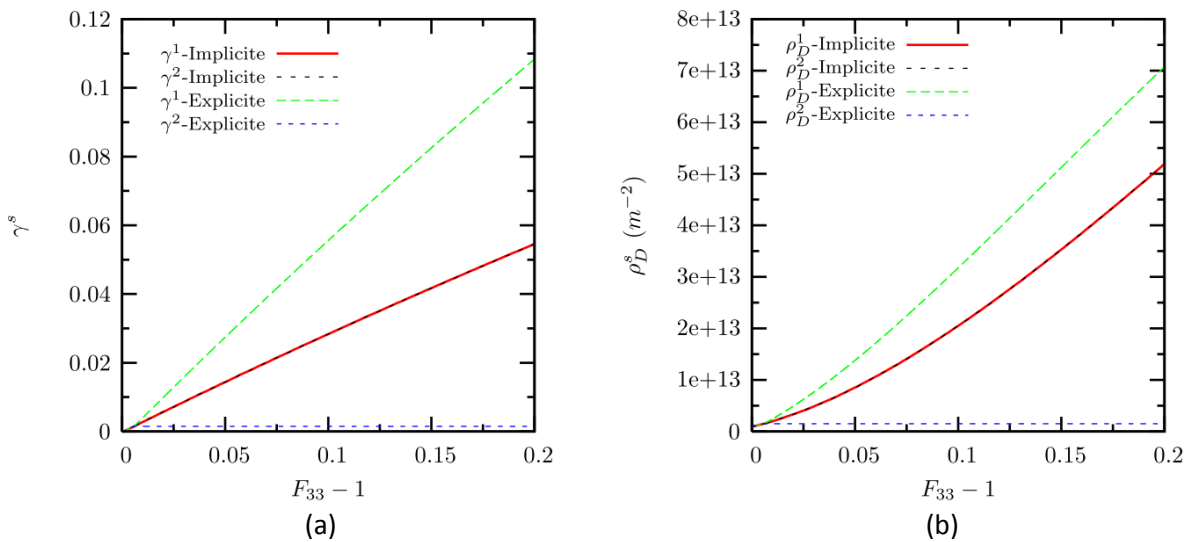


Figure 2.9 : Le phénomène de bifurcation numérique observé suivant la direction de traction [001], pour le matériau à l'état non-irradié. (a) les glissements plastiques, (b) les densités de dislocations.

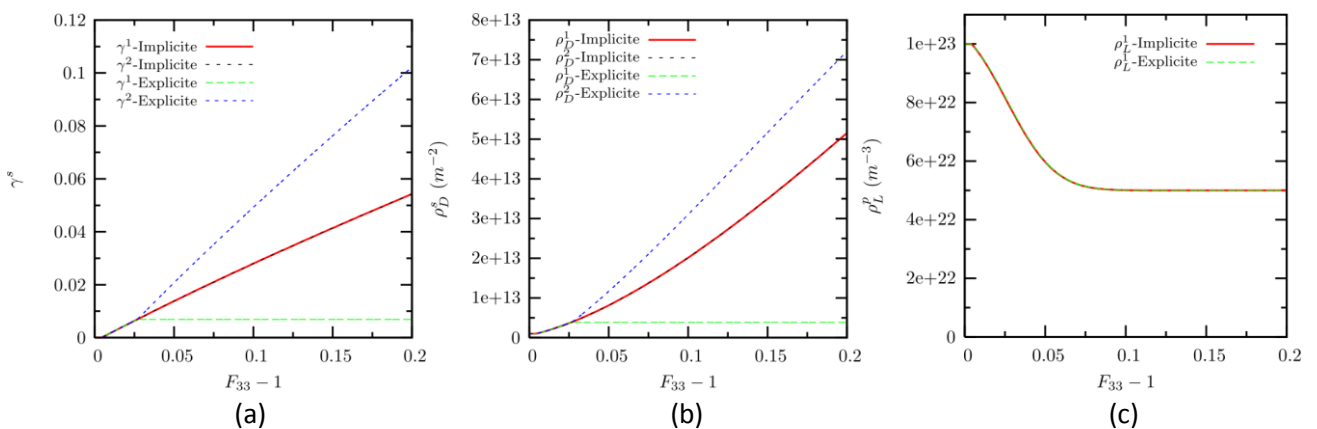


Figure 2.10 : Le phénomène de bifurcation numérique observé suivant la direction de traction [001], pour le matériau à l'état irradié. (a) les glissements plastiques, (b) les densités de dislocations, (c) les densités de boucles de Frank.

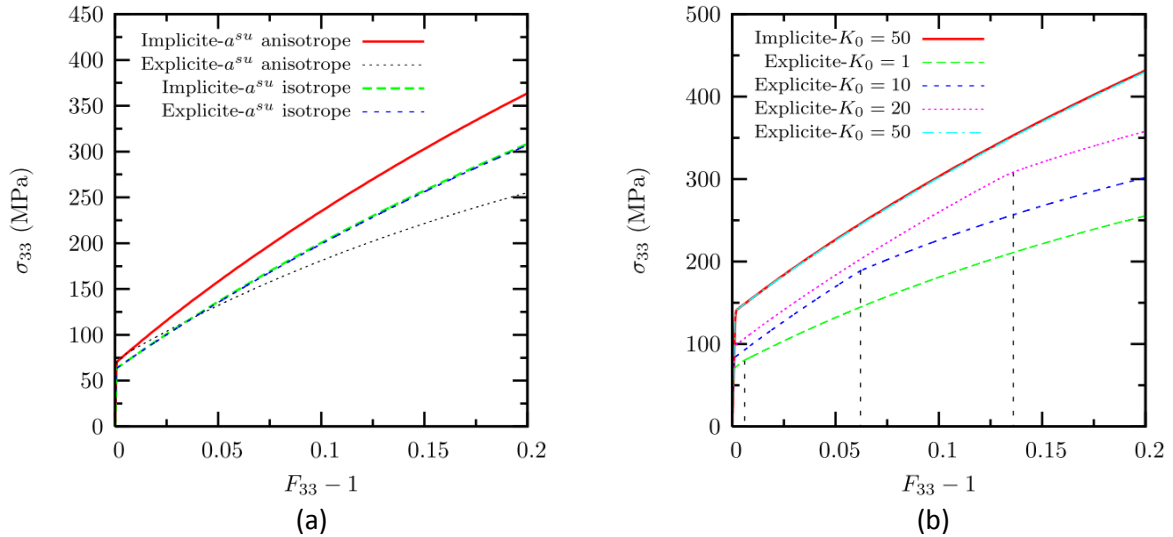


Figure 2.11 : Les facteurs qui influencent le phénomène de bifurcation : (a) la matrice d'interaction  $a^{su}$ , (b) le paramètre de Norton  $K_0$ .

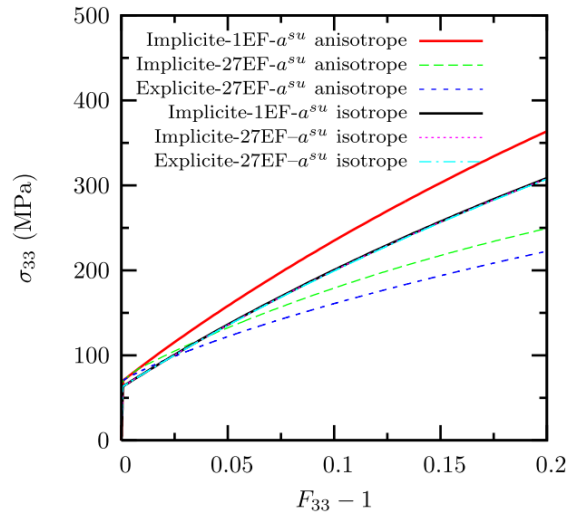


Figure 2.12 : L'observation de bifurcation numérique sur un agrégat monocristallin avec 27 éléments finis cubiques c3d20r. Ce phénomène peut être amélioré soit par l'utilisation d'une matrice d'interaction isotrope, soit par l'augmentation du paramètre de Norton  $K_0$ .

#### 2.5.2.4 Analyse des paramètres du modèle

Avant de commencer l'identification des paramètres pour les états non-irradié et irradié, il est indispensable de réaliser une analyse des paramètres pour notre modèle cristallin complexe, afin de connaître le rôle et la sensibilité de chaque paramètre sur la réponse contrainte-déformation. Les calculs numériques sont effectués sur un élément fini linéaire c3d8 (élément hexaédrique avec 8 nœuds), sollicité en traction suivant l'orientation cristallographique [001]. Les conditions aux limites et de chargement sont les mêmes que celles présentées précédemment dans le **Tableau 2.4**, et les paramètres de référence sont ceux donnés dans le **Tableau 2.5**. Les fonctions et la sensibilité de chaque paramètre analysé sont illustrées respectivement sur la **Figure 2.13** et listées dans le **Tableau 2.8**. Les paramètres de viscosité ( $n$  et  $K_0$ ) n'ont pas été analysés, puisque leurs valeurs seront fixées lors de l'identification des paramètres. Notons que le taux du balayage des boucles de Frank s'exprime par  $c = r_L^{sat} / r_L^p$  (**Figure 2.13(c)**). Certains paramètres présentent des effets similaires (e.g.  $\tau_0$  et  $r_{Dini}^s$ ,

$\kappa$  et  $G_c$ ,  $\alpha_L$  et  $r_{L\ ini}^p$ ), ce qui rendra complexe la phase d'identification. En raison de la complexité de notre modèle avec un grand nombre de paramètres, la connaissance des effets de chaque paramètre devient très importante avant de commencer l'identification des paramètres.

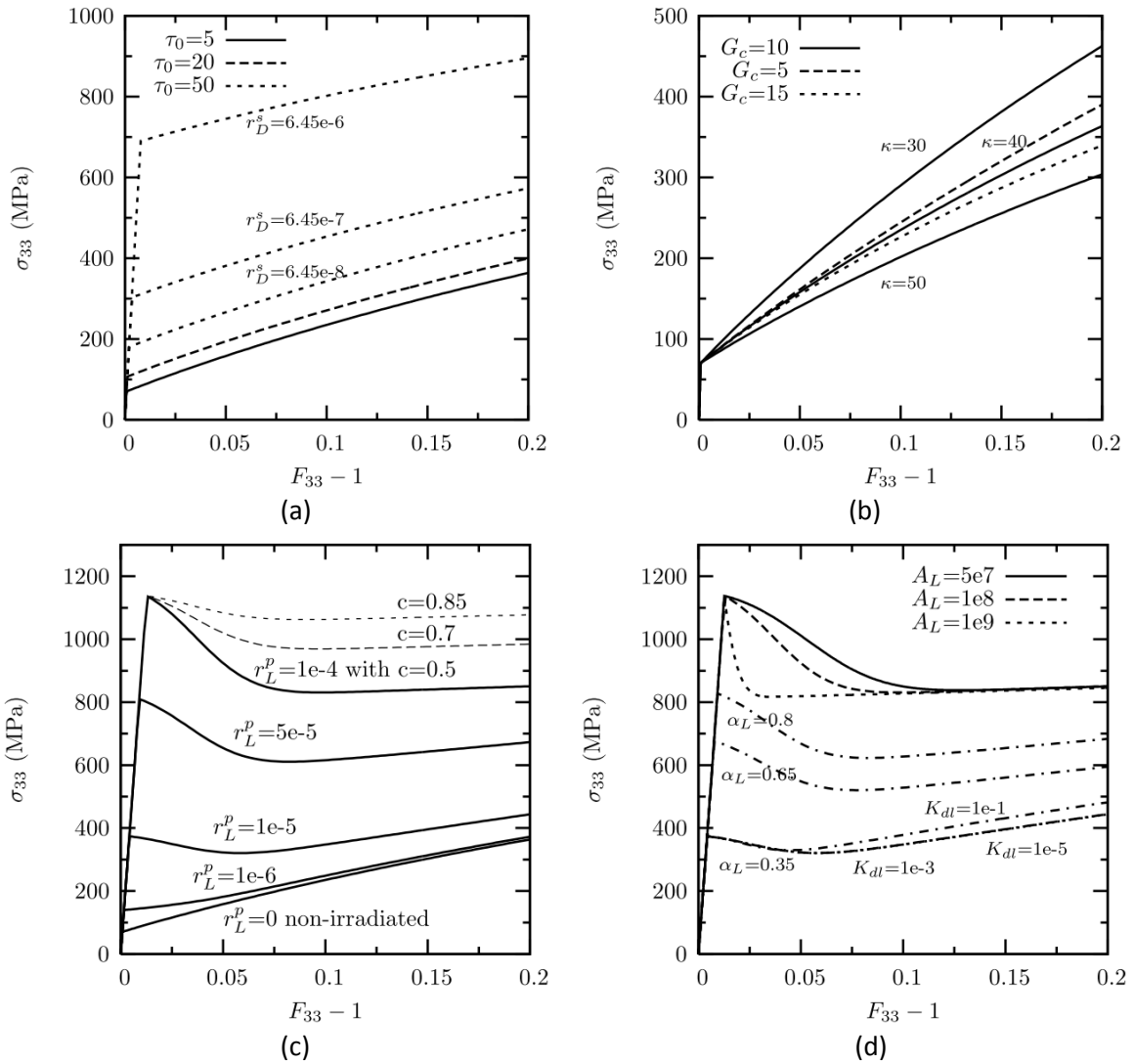


Figure 2.13 : Analyse des paramètres du modèle.

Paramètre	Fonctions	Sensibilité
$\tau_0$	$\tau_0 \nearrow \Rightarrow$ limite d'élasticité $\nearrow$ ; taux d'écroissage $\leftrightarrow$	+
$r_{D\ ini}^s$	$r_{D\ ini}^s \nearrow \Rightarrow$ limite d'élasticité $\nearrow$ ; taux d'écroissage $\leftrightarrow$	-
$\kappa$	$\kappa \nearrow \Rightarrow$ limite d'élasticité $\leftrightarrow$ ; taux d'écroissage $\searrow$	+
$G_c$	$G_c \nearrow \Rightarrow$ limite d'élasticité $\leftrightarrow$ ; taux d'écroissage $\searrow$	-
$r_{L\ ini}^p$	$r_{L\ ini}^p \nearrow \Rightarrow$ limite d'élasticité $\nearrow$ ; adoucissement $\nearrow$ ; taux d'écroissage $\searrow$	++
$c$	$c \nearrow \Rightarrow$ limite d'élasticité $\leftrightarrow$ ; adoucissement $\searrow$ ; taux d'écroissage $\leftrightarrow$	+
$\alpha_L$	$\alpha_L \nearrow \Rightarrow$ limite d'élasticité $\nearrow$ ; adoucissement $\nearrow$ ; taux d'écroissage $\searrow$	++
$K_{dl}$	$K_{dl} \nearrow \Rightarrow$ limite d'élasticité $\leftrightarrow$ ; adoucissement $\searrow$ ; taux d'écroissage $\nearrow$	-
$A_L$	$A_L \nearrow \Rightarrow$ limite d'élasticité $\leftrightarrow$ ; taux d'adoucissement $\nearrow$ ; taux d'écroissage $\leftrightarrow$	+

Tableau 2.8 : Fonctions et sensibilité de chaque paramètre analysé.

### 2.5.2.5 Calculs réalisés avec les angles d'Euler

Les calculs effectués dans la section précédente utilisent la base de la projection cristallographique pour définir des directions de traction par les indices de Miller (e.g. [111]) selon différentes orientations cristallographiques. Un autre moyen en appliquant les angles d'Euler avec la convention de Bunge [Bunge (1965) et Bunge (1982)] (rappelées dans la **Section 1.4.2**) est souhaité pour vérifier les calculs numériques, et surtout pour réaliser les tests sous Cast3M, car ce code de calcul accepte uniquement l'utilisation des angles d'Euler pour représenter une orientation cristalline.

La méthode géométrique permettant d'exprimer une orientation cristallographique par les angles d'Euler est présentée dans l'**Annexe I. 8**. D'après cette méthode, les orientations cristallographiques et les angles d'Euler correspondants sont donnés dans le **Tableau 2.9**.

Orientation cristallographique	$\chi_3$ [001] $\chi_1$ [100]	$\chi_3$ [111] $\chi_1$ [0 $\bar{1}$ 1]	$\chi_3$ [011] $\chi_1$ [0 $\bar{1}$ $\bar{1}$ ]	$\chi_3$ [012] $\chi_1$ [100]	$\chi_3$ [ $\bar{1}$ 25] $\chi_1$ [210]
Angles d'Euler en degré ( $\phi_1, \Phi, \phi_2$ )	(0, 0, 0)	(135, 54.7, 120)	(180, 45, -90)	(180, 26.6, 180)	(-153.4, 24.1, 180)

Tableau 2.9 : Angles d'Euler correspondent à différentes orientations cristallographiques données. Passage du repère global au repère cristallin.

Notons que dans les codes de calcul ZéBuLoN et Cast3M, la matrice de rotation est définie en passant du repère cristallin du matériau au repère global. Par conséquent, il faut inverser l'ordre et le signe des 3 angles d'Euler présentés ci-dessus par  $(-\phi_2, -\Phi, -\phi_1)$ . Après avoir réalisé les tests simples sur un élément fini, il est vérifié que les résultats obtenus avec les deux façons de définir une orientation cristallographique sont exactement les mêmes.

### 2.5.3 Comparaison des résultats obtenus par ZéBuLoN et par Cast3M

Les calculs réalisés sous Cast3M sont basés sur une modification des implantations numériques des lois cristallines pour les matériaux CC avec les méthodes d'intégration implicite et explicite faites par L. Vincent [Vincent (2009) et Vincent (2011)], présentées dans la **Section 2.4**. La seule différence concernant les implémentations numériques dans les codes Cast3M et ZéBuLoN est le choix de la variable interne pour présenter la déformation élastique ( $\underline{\underline{E}}_{GL}^e$  au lieu de  $\underline{\underline{E}}$ ).

La performance de l'implémentation sous ZéBuLoN apparaît meilleure que celle sous Cast3M au niveau du temps de calcul. Avec les paramètres de Norton ( $K_0=1$  et  $n=15$ ), les calculs avec Cast3M présentent souvent des divergences, surtout à l'état irradié où l'intégration est beaucoup plus difficile. Ce fait nous oblige à augmenter la viscosité du modèle à  $K_0=10$  et  $n=15$  pour le matériau irradié, afin de réaliser des tests en comparant avec les résultats obtenus par ZéBuLoN par la méthode implicite qui sont choisis comme références. Toutes les autres valeurs de paramètres sont maintenues. Les calculs sont effectués à 10% de déformation pour les directions de traction suivant les orientations cristallographiques [001], [111], [011] et [012], mais à 15% de déformation pour l'orientation [ $\bar{1}$ 25], afin d'observer l'activation du système de glissement secondaire. Les maillages (toujours sur un seul



élément fini cubique linéaire), les chargements et les conditions aux limites sont identiques entre les deux codes de calcul.

Les **Figure 2.14** et **Figure 2.15** présentent les comparaisons des courbes de traction obtenues par ZéBuLoN et Cast3M, avec la méthode d'intégration implicite de Newton, pour les matériaux non irradié et irradié, respectivement. Il est à remarquer que l'instabilité numérique est également observée dans le code Cast3M pour les cas [001] et [111], avec la méthode d'intégration de Runge-Kutta, comme présentée dans la **Section 2.5.2.3**.

D'après cette analyse, un très bon accord est trouvé entre les implémentations dans les codes de calcul ZéBuLoN et Cast3M, avec les deux méthodes d'intégration.

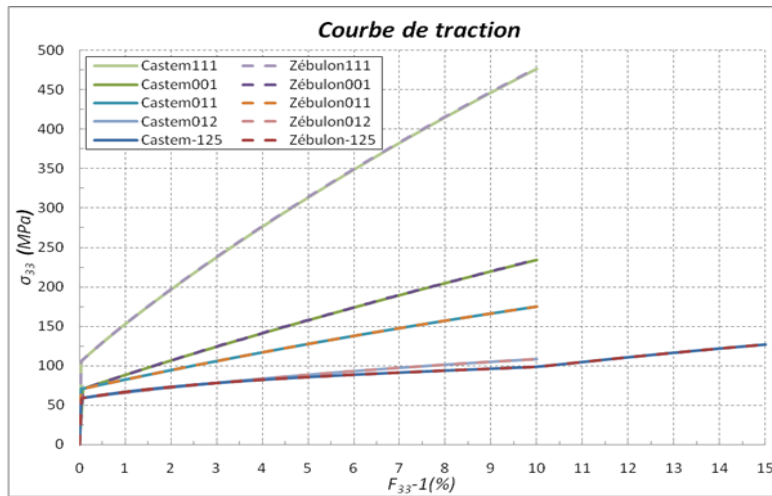


Figure 2.14 : Comparaison des résultats obtenus avec la méthode d'intégration implicite entre ZéBuLoN et Cast3M, pour un matériau à l'état non-irradié, avec  $K_0=1$  et  $n=15$ .

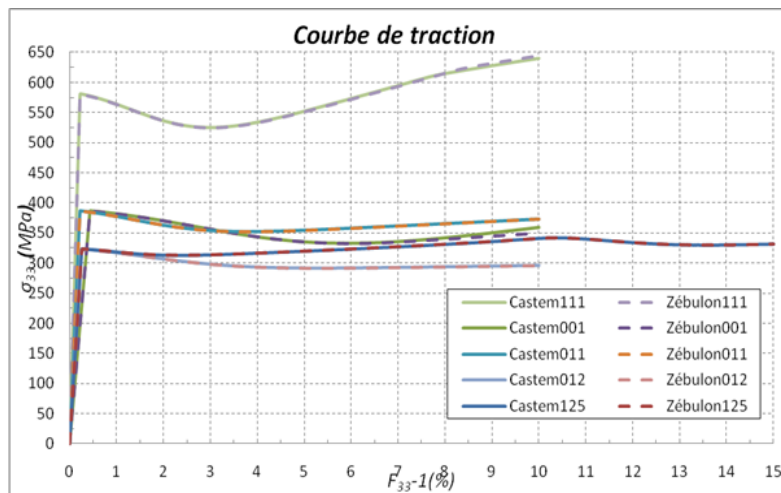


Figure 2.15 : Comparaison des résultats obtenus avec la méthode d'intégration implicite entre ZéBuLoN et Cast3M, pour un matériau à l'état irradié, avec  $K_0=10$  et  $n=15$ .

## 2.6 Bilan et conclusions partielles

Les implémentations numériques des lois cristallines pour les matériaux à l'état non-irradié et irradié ont été effectuées, avec deux méthodes d'intégration (implicite de Newton et explicite de Runge-Kutta), et dans deux codes de calcul (ZéBuLoN et Cast3M).

Les constantes d'élasticité cubique ont été calculées analytiquement et validées numériquement. Les fonctions et la sensibilité de chaque paramètre du modèle ont été analysées. Les tests simples sur un élément fini cubique linéaire suivant différentes orientations cristallographiques ont été réalisés. Les comparaisons des résultats obtenus par ZéBuLoN et Cast3M pour les matériaux aux états non-irradié et irradié présentent une bonne cohérence.

Un phénomène de bifurcation à cause de l'instabilité numérique a été observé lors de certains calculs, surtout pour ceux conduisant à un « grand » nombre de systèmes de glissement activés simultanément. Ce phénomène apparaît plus souvent avec la méthode explicite qu'avec la méthode implicite. Deux origines ont été identifiées : (i) la forme de la matrice d'interaction  $a^{su}$  et (ii) la viscosité introduite dans le modèle ( $n$  et  $K_0$ ). L'augmentation de la viscosité ou la diminution de l'anisotropie de la matrice  $a^{su}$  permet de réduire ou même de faire disparaître le phénomène de bifurcation. Cependant pour notre étude, la matrice  $a^{su}$  est fixée par les résultats issus de la DDD. Notons que le phénomène de bifurcation a été analysé dans la littérature [Hill (1966) et Forest (1998)].

Pour conclure, le modèle cristallin et les implémentations numériques ont été validés pour la suite de la thèse.



# Chapitre 3 : Identification des paramètres des lois cristallines

Après avoir étudié l'influence des paramètres du modèle cristallin, cette partie est consacrée à leur identification. La procédure standard liée à une approche multi-échelle serait d'identifier les paramètres du modèle cristallin à partir du comportement expérimental d'un monocristal puis de valider cette identification en comparant le comportement simulé d'un agrégat polycristallin à une courbe de traction obtenue à partir d'une éprouvette de traction standard. A notre connaissance, aucune donnée expérimentale relative au comportement d'un monocristal d'acier inoxydable n'est disponible à la température d'intérêt (330°C), que ce soit à l'état non irradié ou à l'état irradié. Il existe des courbes de traction sur les monocristaux d'acier 316L avec différentes orientations cristallographiques ([001], [111] et [123]) à la température ambiante, dans la littérature [Karaman et al. (2001)]. Ces courbes de traction ne sont pas utilisées pour identifier les paramètres de la loi cristalline, car la densité de dislocations n'est pas disponible, et surtout car les essais sont réalisés à une température très inférieure 330°C.

Les paramètres du modèle cristallin sont donc identifiés à partir d'une part des courbes de traction existantes dans la littérature, et d'autre part des données microstructurales (densités et diamètres des dislocations initiales et des boucles de Frank) correspondantes. Dans le cadre de ce travail, les efforts d'identification ont porté sur l'acier 304 Hyp, compte tenu de l'application de ce travail à la fragilisation due au gonflement (la formation des cavités apparait plus tôt dans l'acier 304 Hyp que dans l'acier 316 E (**Section 1.2.3.3**)). Les températures d'irradiation et d'essai sont fixées à 330°C. Les lois cristallines pour les aciers inoxydables austénitiques non-irradié et irradié sont présentées dans la **Section 2.2**. Les données existantes à une température donnée pour une vitesse de déformation fixée ne permettent pas d'identifier pleinement les paramètres de Norton, surtout en présence du phénomène de vieillissement dynamique qui peut apparaitre à l'état non irradié pour cette température (**Section 1.1**). La description de ce phénomène nécessiterait des équations constitutives plus complexes mais comme ce phénomène n'est pas observé à l'état irradié, le choix a été fait de ne pas le prendre en compte dans notre étude. Les paramètres de Norton ( $n=15$  et  $K_0=10$ ) sont choisis avec deux objectifs : (i) garantir une faible dépendance de la vitesse introduite dans le modèle comme observé expérimentalement à cette température ; (ii) diminuer au mieux l'instabilité numérique lors des calculs. La matrice d'interaction  $a^{su}$  est choisie identique à celle présentée dans le **Tableau 1.15**, obtenue par G. Monnet par simulations de DDD pour un matériau CFC. Du fait du manque de connaissance, la matrice d'interaction  $b^{su}$  prend la forme la plus simple donnée dans le **Tableau 2.5**. Les constantes d'élasticité sont égales à celles obtenues dans la **Section 2.5.1**. Toutes les valeurs des paramètres mentionnées ci-dessus sont rappelées dans le **Tableau 3.1**.

Température (°C)	$E$ (GPa)	$\nu$	$b_D$ (Å)	$b_L$ (Å)	$\mu$ (GPa)
330	173	0.32	2.54	2.08	66
$C_{11}$ (GPa)	$C_{12}$ (GPa)	$C_{44}$ (GPa)	$n$	$K_0$ (MPa.s <sup>1/n</sup> )	
199	136	105	15	10	
$a_1$	$a_2$	$a_3$	$a_4$	$a_5$	$a_6$
0.124	0.124	0.07	0.625	0.137	0.122
$b_1$	$b_2$	$b_3$	$b_4$	$b_5$	$b_6$
0	1	1	1	1	1

Tableau 3.1 : Coefficients fixés pour le comportement du modèle cristallin.

### 3.1 Données expérimentales liées à la microstructure

Les seules données disponibles dans la littérature ouverte qui correspondent au cadre de cette étude sont celles publiées dans les travaux de C. Pokor [Pokor et al. (2004a) et Pokor et al. (2004c)], dans lesquels on peut trouver les courbes de traction pour un acier 304L Hyp irradié à différentes doses dans le réacteur OSIRIS (spectre comparable à celui d'un REP) (**Figure 3.1**). Les données comprennent également l'évolution quantitative de la densité et de la taille de boucles de Frank. La vitesse de déformation des essais de traction est  $3 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ . De plus, l'évolution quantitative de la densité initiale de dislocations a été présentée dans la **Figure 1.16(b)** de la **Section 1.2.3.1**, issue de [Pokor et al. (2004c)]. Par ailleurs pour compléter ces données, une courbe de traction pour une dose de 13dpa dans les mêmes conditions d'irradiation et d'essai a été fournie sans les données microstructurales [Pokor (2012)]. Les densités et les tailles de boucles de Frank pour cette dose ont été obtenues à partir de celles reportées à 20dpa pour une irradiation à 300°C dans le réacteur à spectre rapide BOR-60. L'utilisation de ces données est justifiée par le fait que d'une part, la microstructure d'irradiation (e.g. boucles de Frank) observée dans les aciers de type 304L Hyp pour une température autour de 300°C est très comparable dans les réacteurs à spectre mixte (REP ou bien OSIRIS) et à neutrons rapides (BOR-60), et d'autre part, que la saturation du comportement mécanique est atteinte pour ces doses (**Section 1.2.2**). Toutes les données expérimentales de la microstructure sont présentées dans le **Tableau 3.2**.

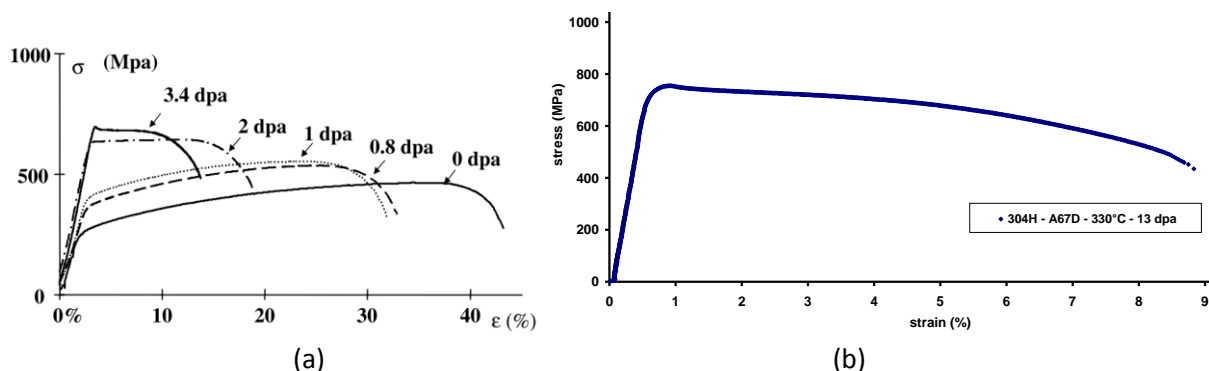


Figure 3.1 : Courbes de traction expérimentales pour un acier 304L Hyp irradié à différentes doses dans le réacteur OSIRIS, avant la correction du module d'Young. La vitesse de déformation est  $3 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ . Les températures d'irradiation et d'essai sont 330°C. (a) données à 0, 0.8, 1, 2, et 3.4dpa issues de [Pokor et al. (2004a)], (b) donnée à 13dpa, issue de [Pokor (2012)].

Doses (dpa)	Densité initiale de dislocations ( $m^{-2}$ )	Densité initiale de boucles de Frank ( $m^{-3}$ )	Diamètre de boucles de Frank (nm) $\pm$ 2nm
0	$10^{10}$	-	-
0.8	$8.4 \cdot 10^9$	$4.5 \cdot 10^{22}$	4.7
2	$6.8 \cdot 10^9$	$7.4 \cdot 10^{22}$	5.9
3.4	$5.5 \cdot 10^9$	$6.3 \cdot 10^{22}$	7.4
13	$1.9 \cdot 10^9$	$6.2 \cdot 10^{22}$	7.3

Tableau 3.2 : Données expérimentales de la microstructure pour l'acier 304L Hyp irradié à différentes doses [Pokor et al. (2004c)]. Les données utilisées pour 13dpa sont prises identiques à celles à 20dpa pour une irradiation à 300°C dans le réacteur à spectre rapide BOR-60, sous l'hypothèse de la saturation du comportement mécanique du matériau pour ces doses.

Notons que la courbe de traction pour le matériau irradié à 1dpa n'est pas prise en compte pour identifier les paramètres des lois de comportement, du fait du manque de données microstructurales correspondantes et de sa position très proche de celle pour le matériau irradié à 0.8dpa qui est comprise dans notre étude. Par ailleurs, les valeurs des diamètres de boucles de Frank pour les matériaux irradiés sont données avec son intervalle d'incertitude dans le **Tableau 3.2**. Néanmoins, seulement les valeurs nominales sont considérées comme les paramètres d'entrée du modèle cristallin.

## 3.2 Mise en œuvre des simulations par éléments finis

Dans cette section, l'ensemble des simulations numériques par éléments finis sont réalisées pour identifier les paramètres des lois cristallines développées dans la section précédente. Une analyse de convergence afin de définir un VER (Volume Élémentaire Représentatif) est également réalisée.

D'après [Maxime et al. (2010), Nguyen (2010) et Liu et al. (2011)], un agrégat polycristallin contenant un certain nombre de grains cubiques avec des orientations cristallographiques aléatoires permet de fournir une première estimation acceptable du comportement macroscopique d'un VER. En suivant la même démarche, l'identification des paramètres est effectuée dans un premier temps sur un maillage d'agrégat polycristallin simplifié : maillage tridimensionnel constitué d'éléments hexaédriques quadratiques réduits sous forme de cube (c3d20r), avec un élément par grain. Après avoir effectué une étude préliminaire de convergence du nombre de grains, il est montré qu'un agrégat polycristallin contenant 343 (7x7x7) grains avec des orientations cristallographiques aléatoires peut représenter un VER en tenant compte de l'efficacité du calcul et de la précision. Le maillage utilisé est présenté sur la **Figure 3.2**, et les conditions aux limites et de chargement sont reportées dans le **Tableau 3.3**. L'utilisation de ces conditions aux limites en imposant les MPC ( $u_i$  ( $i=x, y$  ou  $z$ ) uniforme sur la face correspondante) sur les surfaces libres permet de réduire au maximum l'effet de structure.

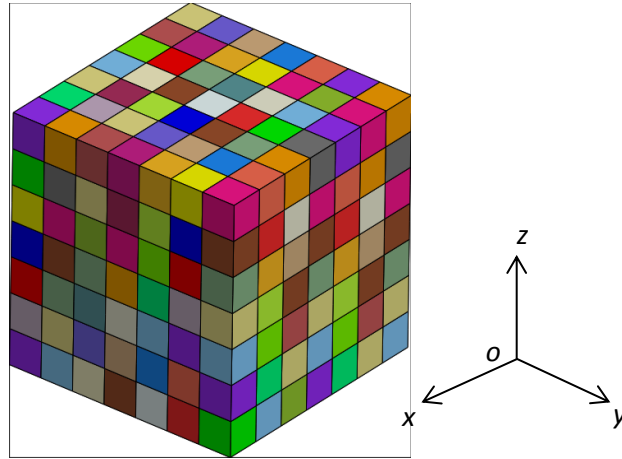


Figure 3.2 : Maillage d'agrégat polycristallin simplifié avec 343 grains cubiques et 1 élément par grain.

<b>Conditions aux limites</b>	$\{x=0\} : U_x=0 ; \{y=0\} : U_y=0 ; \{z=0\} : U_z=0 ;$ $\{x=1\} : \text{MPC suivant } U_x ; \{y=1\} : \text{MPC suivant } U_y$
<b>Chargement</b>	Déplacement imposé suivant la direction z à la face $\{z=1\}$
<b>Vitesse de déformation</b>	$3 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$

Tableau 3.3 : Conditions aux limites et de chargement imposé sur le maillage.

### 3.2.1 Orientations cristallographiques aléatoires définies par les angles d'Euler

On suppose ici qu'un acier inoxydable austénitique de type 304L présente un comportement mécanique macroscopique isotrope. Ceci implique que les orientations cristallographiques de tous les grains dans le matériau sont aléatoires. Afin d'obtenir ces orientations cristallographiques aléatoires, les angles d'Euler avec la convention de Bunge [Bunge (1965) et Bunge (1982)] sont adoptées. Les angles d'Euler ( $\phi_1, \Phi, \phi_2$ ) sont définis dans les intervalles suivants :

$$\phi_1 \in [0, 360^\circ]; \Phi \in [0, 180^\circ] \text{ et } \phi_2 \in [0, 360^\circ]$$

Une approche numérique pour obtenir les 3 angles d'Euler aléatoires est présentée ci-dessous :

$$\begin{aligned} \phi_1 &= r_{\phi_1} \cdot 360^\circ \\ \Phi &= \arccos(2r_\Phi - 1) \cdot \frac{180^\circ}{\pi} \\ \phi_2 &= r_{\phi_2} \cdot 360^\circ \end{aligned}$$

où  $r_{\phi_1}$ ,  $r_\Phi$  et  $r_{\phi_2}$  sont 3 tirages aléatoires entre 0 et 1.

Cette méthode nous permet de fournir les orientations cristallographiques aléatoires pour un nombre de grains donné.

### 3.2.2 Stratégies pour l'identification des paramètres

Cette section consiste à présenter progressivement les différentes étapes réalisées pour identifier les paramètres dans les lois cristallines dans l'optimiseur Levenberg-Marquardt [Marquardt (1963)] du code EF ZéBuLoN. Les paramètres utilisés dans la loi cristalline pour le matériau à l'état non-irradié sont identifiés tout d'abord. Ces paramètres seront conservés à l'identique lors de l'identification des paramètres pour l'état irradié. Ensuite, les différentes stratégies permettant d'identifier les paramètres de la loi cristalline pour le matériau à l'état irradié sont détaillées. Cette démarche permettra une compréhension progressive de l'effet d'irradiation sur le comportement mécanique du matériau.

Avant de commencer l'identification des paramètres, les courbes de traction présentées sur les **Figure 3.1(a)** et **(b)** sont corrigées afin d'obtenir le module d'Young représentatif de celui de l'acier austénitique inoxydable étudié (faute de données expérimentales, il est considéré que l'irradiation ne modifie pas le module d'Young) donné dans le **Tableau 3.1**. Il est nécessaire d'introduire cette correction car les courbes de traction expérimentales ont été tracées à partir du déplacement du vérin et incluent donc l'allongement de la ligne d'amarrage de la machine de traction. Les courbes de traction expérimentales après la correction du module d'Young sont tracées sur la **Figure 3.3**. Sur la même figure, les parties des courbes de traction correspondantes à la région de striction sont enlevées, pour les matériaux non-irradié et irradiés à 0.8 et 2dpa. Par contre, pour les courbes de traction de 3.4 et 13dpa, la zone d'allongement uniforme est trop petite pour réaliser l'identification des paramètres du modèle cristallin. Dans un premier temps, on décide d'enlever un certain niveau de déformation correspondant à la descente accélérée de la contrainte, afin d'obtenir une partie de la courbe de traction pour identifier la loi de comportement des matériaux irradiés à 3.4 et 13dpa (**Figure 3.3**). On suppose qu'ici, avec une forte hypothèse, l'effet de structure n'intervient pas dans les parties des courbes de traction utilisées pour l'identification. L'adoucissement observé sur ces deux courbes n'est provoqué que par les mécanismes intrinsèques des matériaux irradiés à fortes doses (3.4 et 13dpa) présentés dans la **Section 1.3**. Ceci correspond à nos calculs numériques avec l'agrégat polycristallin simplifié utilisé et les conditions aux limites associées, car il n'est pas possible de reproduire la striction observée sur une éprouvette de traction sans identifier les paramètres du modèle cristallin. Il faut aussi préciser, dans ce chapitre, le déplacement et la force associée sont obtenus à partir de l'agrégat polycristallin pour calculer la déformation et la contrainte conventionnelles.

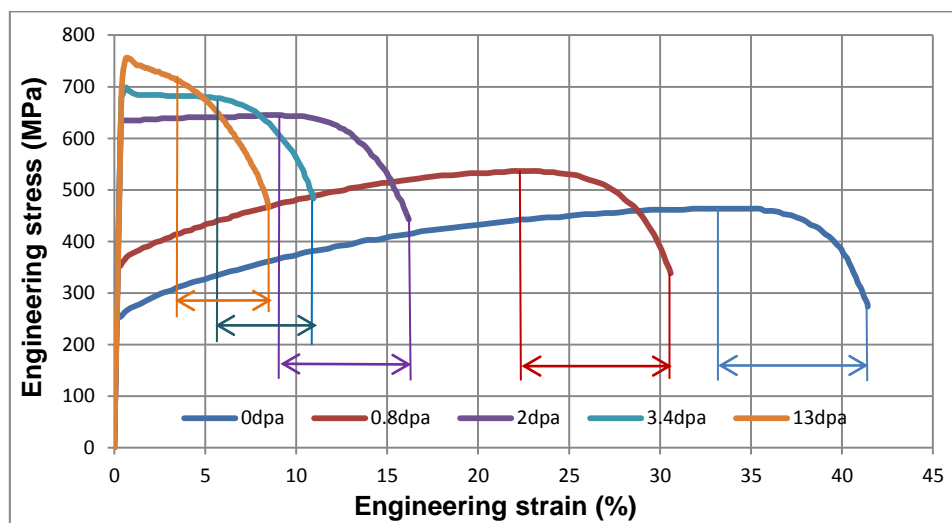


Figure 3.3 : Courbes de traction pour les matériaux non-irradié et irradiés à différentes doses, après la correction du module d'Young. La partie enlevée de chaque courbe est indiquée sur la figure.



Les densités initiales de dislocations (par système de glissement) et de boucles de Frank (par plan de glissement) après le changement de variables (rappelé par l'Équation 2.16), les diamètres de boucles de Frank et les niveaux de déformation étudiés pour les matériaux non-irradié et irradié à différentes doses sont donnés dans le **Tableau 3.4**.

Dose (dpa)	0	0.8	2	3.4	13
$r_{D}^{s\ ini}$ (par système $s$ )	5.38e-11	4.54e-11	3.66e-11	2.97e-11	1.03e-11
$r_{L}^{p\ ini}$ (par plan $p$ )	-	2.29e-6	4.72e-6	5.04e-6	4.9e-6
$\phi_L$ (nm)	-	4.7	5.9	7.4	7.3
Niveau de déformation étudié	33%	22%	9%	6%	3.6%

Tableau 3.4 : Paramètres relatifs à la microstructure en fonction de la dose et niveaux de déformation étudiés lors de l'identification pour les différentes doses.

### 3.2.2.1 Identification des paramètres pour l'état non-irradié

Les paramètres à identifier dans la loi cristalline pour le matériau à l'état non-irradié sont  $\tau_0$ ,  $G_c$ , et  $\kappa$ . D'après les données présentées dans la littérature pour les matériaux de structure CFC (pour le cuivre [Fivel (1997), Cheong et Busso (2004) et Krishna et al. (2010)] et pour l'aluminium [Dumoulin (2001)]), l'ordre de grandeur de chaque paramètre à identifier est bien défini. Les valeurs identifiées sont reportées dans le **Tableau 3.5**. A partir des résultats obtenus pour les CFC, la valeur de  $\tau_0$  pour l'acier 304 à une température autour de 300°C est estimée entre 80 et 90MPa [Monnet (2012)], ce qui est en bon accord avec la valeur de 88MPa obtenue.

$\tau_0$ (MPa)	$G_c$	$\kappa$
88.0	10.4	42.8

Tableau 3.5 : Paramètres identifiés pour le matériau à l'état non-irradié.

Les courbes de traction conventionnelles obtenues par l'essai expérimental et par la simulation numérique à une vitesse de déformation de  $3 \cdot 10^{-4} s^{-1}$  sont reportées sur la **Figure 3.4**. Deux calculs numériques supplémentaires sont réalisés pour une vitesse de  $3 \cdot 10^{-3} s^{-1}$  et  $3 \cdot 10^{-5} s^{-1}$ , respectivement. En appliquant les paramètres identifiés sous ZéBuLoN, un calcul numérique sous Cast3M en utilisant le même maillage d'agrégat (même type d'élément, 343 grains et 1 élément par grain) avec la même orientation cristallographique pour chaque grain et les mêmes conditions aux limites et du chargement est également effectué. Les courbes de traction obtenues sont présentées sur la même figure. D'après les résultats obtenus, on peut constater que notre modèle cristallin est capable de bien reproduire la courbe de traction expérimentale jusqu'à 33% de déformation macroscopique pour l'acier inoxydable austénitique à l'état non-irradié. De plus, la faible sensibilité de la contrainte à la vitesse de déformation de l'acier 304L introduite par le choix des paramètres de Norton est bien vérifiée. Une erreur relative de 1% pour une déformation macroscopique de 33% est observée entre la courbe de traction obtenue par Cast3M et celle obtenue par ZéBuLoN. Il faut souligner que les calculs réalisés sur un agrégat polycristallin simplifié avec les conditions aux limites MPC ne nous permettent que de simuler le comportement du matériau avant l'apparition de la striction. En conséquence, la tangente nulle de la courbe de traction simulée à 33% de déformation n'est pas tout à fait atteinte (

$\partial \sigma_c / \partial \varepsilon_c = \partial F / \partial L \neq 0$ ). On réalisera dans la dernière section de ce chapitre un calcul de structure simplifiée, afin de vérifier le moment où la striction apparaît.

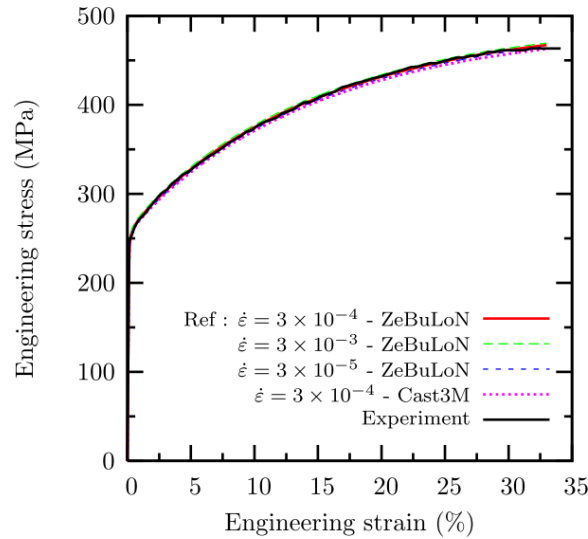


Figure 3.4 : Courbes de traction conventionnelles obtenues par l'expérience et par les calculs numériques à différentes vitesses de déformation macroscopique pour l'acier 304L non-irradié.

Après avoir identifié les paramètres pour l'état non-irradié, une analyse de convergence en nombre de grains avec des orientations cristallographiques aléatoires et en nombre d'éléments par grain a été effectuée. La liste des calculs réalisés est indiquée dans le **Tableau 3.6**. Les maillages utilisés pour les calculs sont présentés dans l'**Annexe I. 9**. Toutes les courbes de traction obtenues sont tracées sur la **Figure 3.5**.

Nom du test	Type d'élément	Nombre de grains	Nombre d'éléments par grain	Nombre d'éléments total	Degrés de liberté
Cube 7x7x7 – 1EF/Grain (réf)	c3d20r	343	1	343	5 568
Cube 7x7x7 – 8EF/Grain	c3d20r	343	8	2 744	38 475
Cube 7x7x7 – 27EF/Grain	c3d20r	343	27	9 261	123 420
Cube 7x7x7 – 64EF/Grain	c3d20r	343	64	21 952	285 099
Cube 10x10x10 – 1EF/Grain	c3d20r	1000	1	1 000	14 883
Cube 10x10x10 – 8EF/Grain	c3d20r	1000	8	8 000	107 163
Cube 10x10x10 – 27EF/Grain	c3d20r	1000	27	27 000	348 843
Cube 20x20x20 – 1EF/Grain	c3d20r	8000	1	8 000	107 163

Tableau 3.6 : Liste des calculs numériques réalisés pour l'étude de convergence relative au volume élémentaire représentatif.

D'après les résultats présentés sur la **Figure 3.5**, on peut observer :

- les courbes de traction obtenues avec différents nombres de grains montrent très peu de différences. Un agrégat polycristallin simplifié avec 343 ( $7^3$ ) grains permet de représenter un nombre suffisant de grains pour obtenir la réponse mécanique macroscopique d'un agrégat polycristallin avec les orientations cristallographiques aléatoires ;
- l'écroûissage diminue avec une augmentation du nombre d'éléments par grain. Cette diminution tend à converger avec un grain construit avec au moins 27 éléments.
- la limite d'élasticité est peu sensible au nombre de grains et au nombre d'éléments par grain pour cette étude.

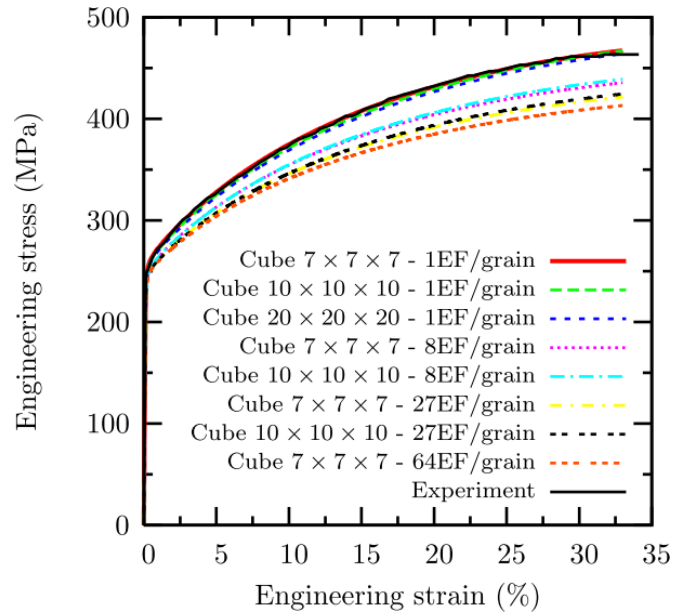


Figure 3.5 : Etude de convergence pour l'état non-irradié, réalisée avec les différents maillages présentés dans le **Tableau 3.6**.

D'après les résultats donnés ci-dessus, il faudrait un maillage d'agrégat polycristallin construit par 343 grains et au moins 27 éléments par grain pour obtenir un comportement convergé du VER. Cependant, l'identification des paramètres basée sur ce maillage serait très coûteuse au niveau du temps de calcul. Par conséquent, dans le cadre de ce travail, il est décidé de réaliser l'identification avec le maillage avec 343 grains et 1 seul élément par grain. Le même maillage sera utilisé afin d'identifier les paramètres pour le matériau irradié. Pour une future étude, avec des puissances de calculs supérieures, les paramètres identifiés devront être réajustés si un autre maillage d'agrégat polycristallin avec plus d'éléments par grain est utilisé. Il est à préciser que l'étude de convergence devra être refaite à l'état irradié car le comportement adoucissant à l'état irradié conduira probablement à des différences de comportement vis-à-vis de la convergence du maillage.

Les paramètres reportés dans le **Tableau 3.5** sont gardés inchangés lors de l'identification pour les matériaux irradiés.

### 3.2.2.2 Identification des paramètres pour l'état irradié – Stratégie 1

Les paramètres à identifier dans la loi cristalline pour le matériau à l'état irradié sont au nombre de 4 :  $\alpha_L$ ,  $K_{dl}$ ,  $A_L$  et  $r_L^{sat}$ , sachant que  $A_L = \frac{A}{b_D^3} \phi_L = A_b \phi_L$  et  $r_L^{sat} = c \cdot r_{Lini}^p$ .

Le modèle « **la racine de la somme** » est adopté ici pour l'identification (rappelé dans la **Section 2.2.2a**). Dans un premier temps, on essaie d'identifier les paramètres en gardant  $\alpha_L$ ,  $K_{dl}$  et  $A_b$  identiques pour les 4 doses étudiées. Par contre, les études de DDD menées au CEA par C. Robertson semblent montrer que le taux de balayage  $c$  dépend de la dose. On note que le paramètre  $A_L$  est obtenu comme une fonction de  $\phi_L$  à identifier qui dépend de la dose, et le paramètre  $r_L^{sat}$  est obtenu à partir du produit du taux de balayage  $c$  à identifier pour chaque dose et de la densité initiale de boucles de Frank  $r_{Lini}^p$  correspondante.

D'après les résultats présentés au **Chapitre 2**, seul le paramètre du modèle  $\alpha_L$  décrivant la force d'obstacles effective des boucles de Frank joue un rôle notable sur la limite d'élasticité. Un calcul analytique préliminaire des limites d'élasticité aux différentes doses montre qu'un paramètre  $\alpha_L$  constant pour toutes les doses ne permet pas de retrouver les bonnes limites d'élasticité. La dépendance apparente du paramètre  $\alpha_L$  pourrait résulter de l'incertitude sur la mesure au MET de la densité de boucles de Frank. Selon Gan [Gan (1999)], la différence de mesure de la densité de boucles de Frank par deux individus peut atteindre environ 30%. De plus, en utilisant les MET avec différentes résolutions, l'erreur de mesure peut présenter un facteur de 2. Afin d'estimer l'effet de la densité initiale de boucles de Frank sur la limite d'élasticité obtenue, on décide d'identifier tout d'abord les paramètres avec la courbe de traction expérimentale à 3.4dpa avec les données microstructurales de la littérature [Pokor et al. (2004c)] comme référence ( $r_L^p = 5.04 \text{ e-6}$  ( $\rho_L^p = 1.58 \text{ e22m}^{-3}$ ) et  $\phi_L = 7.4 \text{ e-9m}$ ), et puis d'évaluer les densités de boucles de Frank à chaque dose en maintenant les paramètres ( $\alpha_L, K_{dl}$  et  $A_b$ ) constant.

Les paramètres  $\alpha_L, K_{dl}, A_b$  et  $c$  obtenus pour une dose de 3.4dpa sont donnés dans le **Tableau 3.7**.

$\alpha_L$	$K_{dl}$	$A_L = A_b * \phi_L$	$r_L^{sat} = c * r_L^p$
0.649	1.78e-10	3.6e20 * $\phi_L$	0.58 * $r_L^p$

Tableau 3.7 : Stratégie 1 : paramètres identifiés à partir de données à 3.4dpa.

Ensuite, les densités initiales de boucles de Frank  $r_L^p$  et celles à la saturation  $r_L^{sat}$  pour les autres doses sont réajustées comme paramètres à identifier afin d'obtenir la bonne limite d'élasticité pour chaque dose. Les résultats obtenus sont présentés dans le **Tableau 3.8**, avec la présence les données de la littérature [Pokor et al. (2004c)]. Les courbes de traction expérimentales et simulées sont illustrées sur la **Figure 3.6**.

	<b>0.8dpa</b>	<b>2dpa</b>	<b>13dpa</b>
$r_L^p$	2.8e-7	3.4e-6	7.1e-6
( $\rho_L^p$ en $\text{m}^{-3}$ )	(1.37 e21)	(1.33 e22)	(2.25 e22)
$r_L^{sat}$	1.0 * $r_L^p$	0.81 * $r_L^p$	0.42 * $r_L^p$
( $\rho_L^{sat}$ en $\text{m}^{-3}$ )	(1.0 * $\rho_L^p$ )	(0.81 * $\rho_L^p$ )	(0.42 * $\rho_L^p$ )
$r_L^p$ (référence)	2.29e-6	4.72e-6	4.9e-6
( $\rho_L^p$ en $\text{m}^{-3}$ )	[1.3e-6, 3.3e-6]	[3.1e-6, 6.3e-6]	[3.5e-6, 6.2e-6]
[Pokor et al. (2004c)]	(1.12 e22)	(1.85 e22)	(1.55 e22)

Tableau 3.8 : Paramètres réajustés pour les doses de 0.8dpa, 2dpa et 13dpa, en comparant avec les données expérimentales obtenues dans la littérature, y compris les intervalles d'incertitude de mesure [Pokor et al. (2004c)]. Les valeurs physiques des densités de boucles de Frank correspondantes sont données entre parenthèses.

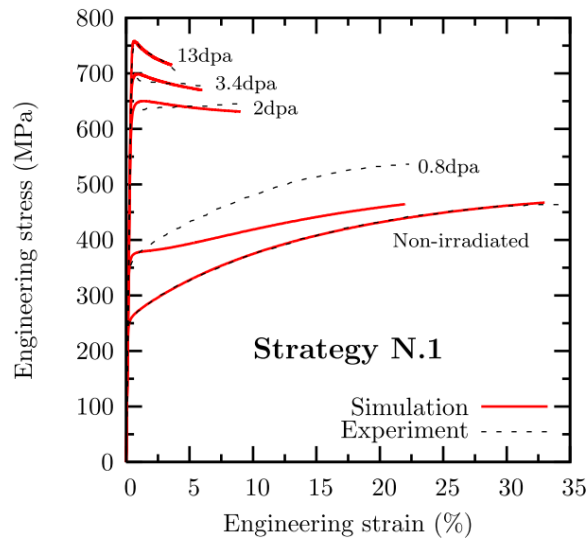


Figure 3.6 : Stratégie 1 : courbes de traction expérimentales et simulées pour les matériaux non-irradié et irradiés à différentes doses.

### Analyse des résultats pour la stratégie 1 :

En supposant que le paramètre  $\alpha_L$  ne dépend pas de la dose et afin d’atteindre la bonne limite d’élasticité pour chaque dose, les paramètres  $r_L^p$  pour 0.8dpa, 2dpa et 13dpa doivent être réajustés par rapport aux données expérimentales présentées dans la littérature [Pokor et al. (2004c)]. Les conclusions suivantes sont obtenues :

- Le paramètre  $r_L^{sat}$  diminue quand la dose augmente ;
- Si les valeurs du paramètre  $r_L^p$  réajustées à 2 et 13dpa pourraient être cohérentes avec l’incertitude expérimentale, la valeur réajustée pour 0.8dpa ne correspond pas à l’ordre de grandeur du paramètre expérimental. Un rapport d’environ 8 entre la densité expérimentale et la densité réajustée est constaté ;
- Les courbes de traction simulées pour 2dpa, 3.4dpa et 13dpa sont acceptables par rapport aux résultats expérimentaux. Un durcissement suivi par un adoucissement est observé ;
- La courbe de traction simulée pour 0.8dpa ne peut pas présenter le bon écrouissage. Une sous-estimation de la contrainte macroscopique croissante avec la déformation est observée. De ce fait, à 0.8dpa, le taux de balayage obtenu est égal à 0 pour que la courbe simulée soit plus proche de la courbe expérimentale.

D’après les résultats présentés ci-dessus, on peut conclure que, dans la stratégie 1, notre modèle ne peut pas reproduire les niveaux de durcissement pour différentes doses, notamment à 0.8dpa, en maintenant le paramètre  $\alpha_L$  identique pour chaque dose et en utilisant les données microstructurales expérimentales de la littérature. A partir de l’identification, on obtient que le taux de balayage des boucles de Frank,  $c$ , augmente avec la dose, ce qui se traduit par un adoucissement plus notable. La valeur du paramètre identifié montre une vitesse de balayage des boucles de dislocations très rapides dès que le glissement plastique apparaît. Le modèle « **la racine de la somme** » avec les paramètres identifiés ne permet donc pas de simuler le comportement du matériau irradié à faibles doses (e.g. 0.8dpa).

### 3.2.2.3 Identification des paramètres pour l’état irradié – Stratégie 2

A partir des calculs de DDD réalisés au CEA par C. Robertson, une sous-estimation de l'effet de durcissement en ne considérant que les boucles de Frank comme mécanisme durcissant de type barrière dispersée a été observée [Tanguy et al. (2012)]. Ces résultats ont été confirmés par les simulations DDD réalisées par G. Monnet à EDF [Monnet (2012)]. De plus, une évolution du mécanisme de durcissement a probablement lieu entre une faible dose (*e.g.* 0.8dpa) et une dose plus élevée (*e.g.*  $\geq 2$ dpa). Par ailleurs, les simulations numériques par la DDD montrent d'une part que le balayage des boucles de Frank d'un point de vue macroscopique au sein de l'agrégat polycristallin ne dépasse pas 15% dans un matériau irradié et d'autre part que la vitesse de balayage des boucles de Frank augmente avec la dose avant d'atteindre une saturation. Par conséquent, l'adoucissement observé pour les fortes doses est probablement lié à un autre mécanisme de déformation présenté dans la stratégie suivante. Il est donc proposé ici d'intégrer ces mécanismes physiques observés à une échelle de simulation inférieure dans notre modèle cristallin. Cette modélisation correspond à la stratégie 2 de notre phase d'identification.

Un effet d'ancrage des dislocations décrivant phénoménologiquement le mécanisme de durcissement par blocage des sources induites par les cascades (rappelé dans la **Section 1.3.2**) est donc introduit dans notre modèle cristallin « **la racine de la somme** », afin de s'ajouter à l'effet de durcissement par barrières dispersées. Ce mécanisme d'ancrage conduit également à un mécanisme d'adoucissement lorsque les dislocations décorées sont désancrées ou lorsque de nouvelles sources de dislocations sont activées. L'intégration de ce mécanisme adoucissant conduira donc à une diminution de l'effet d'adoucissement par balayage des boucles de Frank pour les fortes doses. L'expression phénoménologique suivante est proposée :

$$\tau_{aval} = \tau_a \exp\left(-\frac{|\gamma_s|}{\gamma_0}\right) \quad \text{Équation 3.1}$$

avec  $\tau_a$  la cission nécessaire dépendante de la dose pour débloquer les dislocations et  $\gamma_0$  le coefficient permettant de régler la vitesse d'avalanche après la désancrage des dislocations.

La cission critique pour un matériau à l'état irradié (**Équation 2.19**) s'écrit alors :

$$\tau_c^s = \tau_0 + \tau_{aval} + \tau_\mu = \tau_0 + \tau_a \exp\left(-\frac{|\gamma_s|}{\gamma_0}\right) + \mu \sqrt{\sum_u \alpha^{su} r_D^u + \alpha_L^2 \sum_p r_L^p} \quad \text{Équation 3.2}$$

La dérivée partielle dans la matrice jacobienne mise à jour est présentée dans l'**Annexe I. 10**.

Une analyse paramétrique de l'effet des nouveaux paramètres  $\tau_a$  et  $\gamma_0$  est illustrée sur la **Figure 3.7**. Il est montré que l'ajout de l'effet d'avalanche peut fournir un autre facteur durcissant permettant de s'ajouter au durcissement par les boucles de Frank, et un autre facteur adoucissant permettant de diminuer le taux de balayage des boucles de Frank. Notons que selon les travaux de Trinkaus et Singh [Trinkaus et al. (1997a), Singh et al. (1997) et Trinkaus et al. (1997b)], le blocage des sources induites par les cascades n'apparaît que dans les cas de fortes doses (dans notre cas pour une dose  $\geq 2$ dpa) où les amas de défauts ponctuels sont assez nombreux pour ancrer les lignes de dislocations.

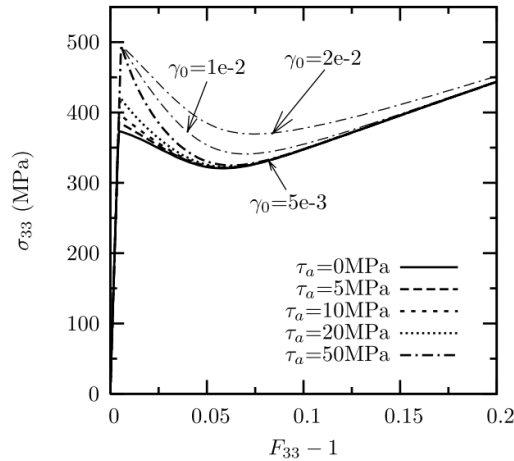


Figure 3.7 : Analyse des paramètres  $\tau_a$  et  $\gamma_0$  dans le modèle cristallin.

Une fois le modèle cristallin modifié avec la description de l’ancrage des dislocations, une autre stratégie est proposée pour identifier les paramètres : Les données microstructurales (densités et diamètre des boucles de Frank) de la littérature [Pokor et al. (2004c)] sont utilisées comme données d’entrée du modèle. Par contre, afin de résoudre le problème de niveaux de durcissement rencontré dans la stratégie 1, on identifie une valeur du paramètre  $\alpha_L$  pour chaque dose. D’après l’analyse des paramètres  $\tau_a$  et  $\gamma_0$ ,  $\tau_a$  dépend de la dose et est seulement présent pour les fortes doses.  $\gamma_0$  est pris constant et est choisi égal à 0.005, pour que l’effet d’avalanche disparaisse rapidement après le désancrage des dislocations. Les résultats de l’identification sont donnés dans le **Tableau 3.9**, et les courbes de traction simulées sont présentées sur la **Figure 3.8**.

	<b>0.8dpa</b>	<b>2dpa</b>	<b>3.4dpa</b>	<b>13dpa</b>
$\alpha_L$	0.17	0.53	0.54	0.57
$K_{dl}$	0.66			
$A_L = A_b * \phi_L$	$1e19 * \phi_L$	$1e19 * \phi_L$	$1e19 * \phi_L$	$1e19 * \phi_L$
$r_L^{sat} = c * r_L^p ini$	$0.8 * r_L^p ini$	$0.6 * r_L^p ini$	$0.72 * r_L^p ini$	$0.48 * r_L^p ini$
$(\rho_L^{sat} \text{ en } m^{-3})$	$(0.8 * \rho_L^p ini)$	$(0.6 * \rho_L^p ini)$	$(0.72 * \rho_L^p ini)$	$(0.48 * \rho_L^p ini)$
$\tau_a (MPa)$	-	29.8	49	29.7

Tableau 3.9 : Stratégie 2 : paramètres identifiés pour les matériaux irradiés à différentes doses.

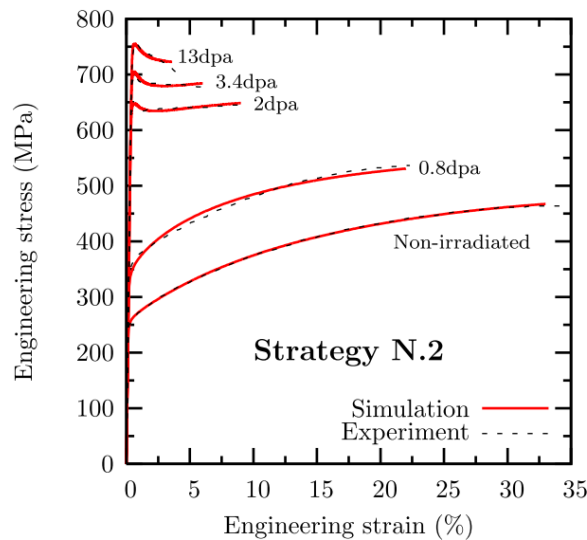


Figure 3.8 : Stratégie 2 : courbes de traction expérimentales et simulées pour les matériaux non-irradié et irradiés à différentes doses.

### Analyse des résultats pour la stratégie 2 :

Dans la stratégie 2, le paramètre  $\alpha_L$  est supposé dépendre de la dose. Un mécanisme de durcissement par ancrage des dislocations qui induit un effet d'avalanche est rajouté dans notre modèle afin de partager les effets de durcissement et d'adoucissement. Cette modification a été proposée à partir des mécanismes observés à une échelle inférieure par simulations de DDD. Les données microstructurales de la littérature [Pokor et al. (2004c)] sont prises comme données d'entrée du modèle lors de l'identification des paramètres. Les conclusions suivantes sont obtenues :

- La valeur du paramètre  $\alpha_L$  augmente avec la dose ;
- Les valeurs des paramètres  $r_L^{sat}$  et  $\tau_a$  ne montrent pas une dépendance monotone avec la dose ;
- L'effet d'avalanche n'est actif que pour les doses à partir de 2 dpa (2dpa, 3.4dpa et 13dpa) ;
- Les courbes de traction simulées pour toutes les doses présentent un bon accord avec celles obtenues par les expériences.

Le paramètre  $K_{dl}$  joue un rôle mineur dans notre modèle cristallin (**Section 2.5.2.4**). L'augmentation de  $K_{dl}$  permet d'augmenter la multiplication des dislocations pour un matériau irradié. Afin de simuler l'écrouissage de la courbe de traction pour 0.8dpa, la valeur de  $K_{dl}$  identifiée dans la stratégie 2 ( $K_{dl} = 0.66$ ) est beaucoup plus grande que celle identifiée dans la stratégie 1 ( $K_{dl} = 1.78e-10$ ). Cependant, cette valeur identifiée implique que la multiplication des dislocations est majoritairement prédominée par les boucles de Frank en tenant compte de la densité de boucles de Frank  $r_L^p$  (l'ordre de grandeur de  $10^{-6}$ ) et la densité de dislocations  $r_D^s$  (l'ordre de grandeur de  $10^{-11}$ ) avec  $\sum_u b^{su} r_D^u \ll K_{dl} \sum_p r_L^p$ , ce qui ne correspond pas à un mécanisme physique reconnu aux observations de la littérature. Par contre, dans la stratégie 1, on a trouvé une conclusion opposée sur ce point-là ( $\sum_u b^{su} r_D^u \gg K_{dl} \sum_p r_L^p$ ). Compte tenu de la réalité de microstructure dans les matériaux irradiés, bien que les courbes de traction simulées et expérimentales à 0.8dpa soient en bon accord, il apparait que la valeur identifiée du paramètre  $K_{dl}$  est peu physique, car les boucles de Frank ne peuvent pas créer une augmentation des dislocations aussi forte. Une autre solution permettant d'obtenir le compromis nécessaire entre la description du comportement mécanique macroscopique du matériau et la connaissance de la microstructure est recherchée dans la section suivante.

#### 3.2.2.4 Identification des paramètres pour l'état irradié – Stratégie 3

Du fait que les deux démarches présentées précédemment avec le modèle « **la racine de la somme** » apparaissent insuffisantes pour simuler le comportement pour le matériau irradié à 0.8dpa avec des paramètres identifiés réalistes qui correspondent à l'état de l'art, un nouveau formalisme du modèle cristallin est appliqué. Le modèle « **la somme des racines** » est utilisé pour identifier les paramètres (rappelé dans la **Section 2.2.2b**). Une étude préliminaire est réalisée et présentée ci-dessous pour analyser mathématiquement la différence entre les modèles « **la somme des racines** » et « **la racine de la somme** ».

En posant que les modèles « **la somme des racines** » et « **la racine de la somme** » peuvent être représentés respectivement par les formules  $f = \sqrt{a} + \sqrt{b}$  et  $g = \sqrt{a+b}$ , où  $a$  représente la densité de dislocations et  $b$  représente la densité de boucles de Frank, les dérivées de  $f$  et  $g$  donnent :



$$f' = (\sqrt{a} + \sqrt{b})' = \frac{1}{2} \frac{a'}{\sqrt{a}} + \frac{1}{2} \frac{b'}{\sqrt{b}} \quad \text{et} \quad g' = (\sqrt{a+b})' = \frac{1}{2} \frac{a'}{\sqrt{a+b}} + \frac{1}{2} \frac{b'}{\sqrt{a+b}}$$

Dans notre cas où la densité initiale de dislocations est fortement inférieure à la densité initiale de boucles de Frank, on a  $a \ll b$ . En cette circonstance,  $g' \cong \frac{1}{2} \frac{a'}{\sqrt{b}} + \frac{1}{2} \frac{b'}{\sqrt{b}}$ . Le terme  $\frac{1}{2} \frac{a'}{\sqrt{a}}$  est donc bien supérieur à  $\frac{1}{2} \frac{a'}{\sqrt{b}}$ . Supposons que pour une faible dose (e.g. 0.8dpa), l'évolution de  $b$  soit très

faible ( $\approx 0$ ), l'expression de  $f'$  pour le matériau irradié est quasiment équivalente à l'expression de  $f'$  pour le matériau non-irradié (sans terme de  $b$ ). Par conséquent, pour un acier inoxydable austénitique 304L hypertrempe, les taux d'écroissage pour un matériau irradié à une faible dose et pour un matériau non-irradié étant quasiment les mêmes (**Figure 1.12**), le modèle « **la somme des racines** » apparaît plus adapté pour simuler le comportement mécanique pour les différentes doses. Par contre, pour le cuivre, les deux modèles peuvent être appliqués car le taux d'écroissage diminue dès une très faible dose de 0.01dpa [Trinka et al. (1997b)]. Le choix du modèle dépend donc des données expérimentales de la microstructure.

Le modèle « **la somme des racines** » est donc choisi pour réaliser la stratégie 3. Le terme décrivant l'effet d'ancrage est également gardé pour l'identification des paramètres (**Équation 3.3**), avec  $\gamma_0$  fixé à 0.05 car il correspond à un mécanisme physique obtenu par les simulations de DDD. Les données de la microstructure reportées dans la littérature [Pokor et al. (2004c)] sont toujours utilisées comme données d'entrée du modèle. Les résultats de l'identification sont présentés dans le **Tableau 3.10**, et les courbes de traction simulées sont présentées sur la **Figure 3.9**.

$$\tau_c^s = \tau_0 + \tau_{aval} + \tau_\mu = \tau_0 + \tau_a \exp\left(-\frac{|\gamma_s|}{\gamma_0}\right) + \mu \left( \sqrt{\sum_u a^{su} r_D^u} + \alpha_L \sqrt{\sum_p r_L^p} \right) \quad \text{Équation 3.3}$$

	<b>0.8dpa</b>	<b>2dpa</b>	<b>3.4dpa</b>	<b>13dpa</b>
$\alpha_L$	0.21	0.44	0.49	0.57
$K_{dl}$	0.25e-6			
$A_L = A_b * \phi_L$	-	$7.6e16 * \phi_L$	$7.6e16 * \phi_L$	$7.6e16 * \phi_L$
$r_L^{sat} = c * r_L^p$	$1.0 * r_L^p$	$0.8 * r_L^p$	$0.79 * r_L^p$	$0.66 * r_L^p$
$(\rho_L^{sat} \text{ en } m^{-3})$	$(1.0 * \rho_L^p)$	$(0.8 * \rho_L^p)$	$(0.79 * \rho_L^p)$	$(0.66 * \rho_L^p)$
$\tau_a (MPa)$	-	50.0	61.3	61.2

Tableau 3.10 : Stratégie 3 : paramètres identifiés pour les matériaux irradiés à différentes doses.

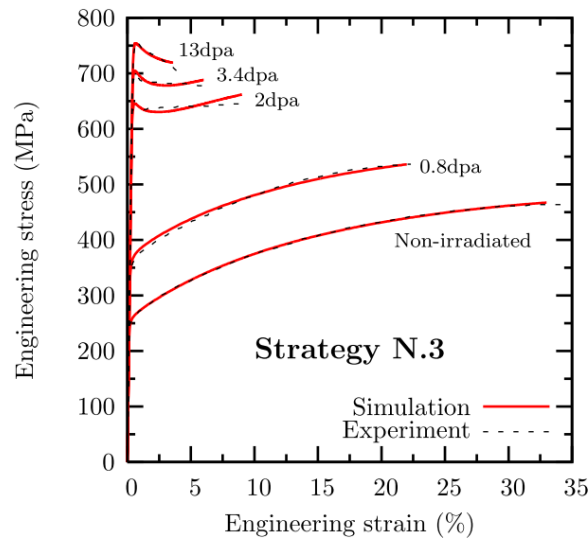


Figure 3.9 : Stratégie 3 : courbes de traction expérimentales et simulées pour les matériaux non-irradié et irradiés à différentes doses.

### Analyse des résultats pour la stratégie 3 :

Dans cette stratégie, le paramètre  $\alpha_L$  est toujours supposé dépendre de la dose. Le modèle « **la somme des racines** » est adopté au lieu du modèle « **la racine de la somme** » utilisé dans les deux stratégies précédentes. L'effet d'ancrage des dislocations est décrit dans le modèle retenu. Toutes les données microstructurales dans la littérature [Pokor et al. (2004c)] sont utilisées comme données d'entrée du modèle lors de l'identification des paramètres. Les conclusions suivantes sont obtenues :

- Les valeurs des paramètres  $\alpha_L$  et  $\tau_a$  augmentent avec la dose. La valeur de  $\tau_a$  semble atteindre une saturation pour les fortes doses (3.4dpa et 13dpa) ;
- La valeur du paramètre  $r_L^{sat}$  diminue quand la dose augmente ;
- L'effet d'ancrage n'existe que pour les fortes doses (2dpa, 3.4dpa et 13dpa) ;
- Les courbes de traction simulées pour toutes les doses présentent une bonne cohérence avec celles obtenues par les expériences.

Dans la stratégie 3, le paramètre  $K_{dl}$  identifié permet d'augmenter légèrement la multiplication des dislocations d'un matériau irradié. Ceci semble être en accord avec le mécanisme d'annihilation présenté dans la **Section 1.3.1**. Une analyse simple est effectuée en mettant la valeur de  $K_{dl}$  à 0 et en gardant tous les autres paramètres identifiés dans la stratégie 3, afin de vérifier l'influence du paramètre sur le comportement des matériaux irradiés. Selon les résultats obtenus présentés sur la **Figure 3.10**, la valeur de  $K_{dl}$  identifiée présente une influence assez faible dans notre modèle sur le comportement. Une différence maximale de 0.5MPa est trouvée sur toutes les courbes de traction simulées par rapport aux courbes obtenues dans la **Figure 3.9**. L'inconvénient du modèle « **la somme des racines** » est que les courbes de traction simulées pour les fortes doses remontent visiblement après la phase d'adoucissement. Cependant, vu que l'effet de structure n'est pas pris en compte lors du processus d'identification des paramètres, cette remontée peut être atténuée par la présence de la striction favorisée par l'adoucissement sur une vraie structure. Les moyennes des densités surfaciques totales de dislocations  $\left\langle \sum_{s=1..12} \rho_D^s \right\rangle_{V_{tot}}$  et de boucles de Frank  $\left\langle \sum_{p=1..4} \phi_L \rho_L^p \right\rangle_{V_{tot}}$  en fonction de la déformation

macroscopique pour différentes doses sont présentées respectivement sur les **Figure 3.11(a)(b)**. Leurs valeurs initiales et finales (à la fin de l'identification) sont reportées dans le **Tableau 3.11**. L'évolution de la densité de dislocations dans tous les cas est assez proche pour les différents états. Sur la **Figure 3.11(a)**, on peut constater que les densités de dislocations pour les fortes doses (2dpa, 3.4dpa et

13dpa) augmentent un peu moins rapidement que celles pour l'état non-irradié et pour une faible dose de 0.8dpa. Ceci peut être expliqué par une disparition du réseau initial des dislocations pour les fortes doses. Le défautement des boucles de Frank ne peut pas compenser cette perte, car le paramètre  $K_{dl}$  identifié est assez faible. Sur la **Figure 3.11(b)**, la vitesse de balayage des boucles de Frank augmente avec la dose. Le taux de balayage des boucles pour une forte dose ne dépasse pas 15% (**Tableau 3.11**), ce qui montre un accord avec le résultat obtenu par la simulation DDD réalisée par C. Robertson au CEA.

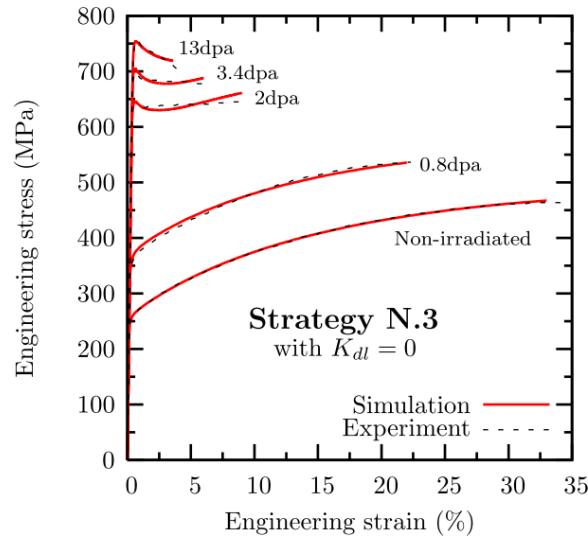


Figure 3.10 : Courbes de traction expérimentales et simulées pour les matériaux non-irradié et irradiés à différentes doses, en posant le paramètre  $K_{dl} = 0$ .

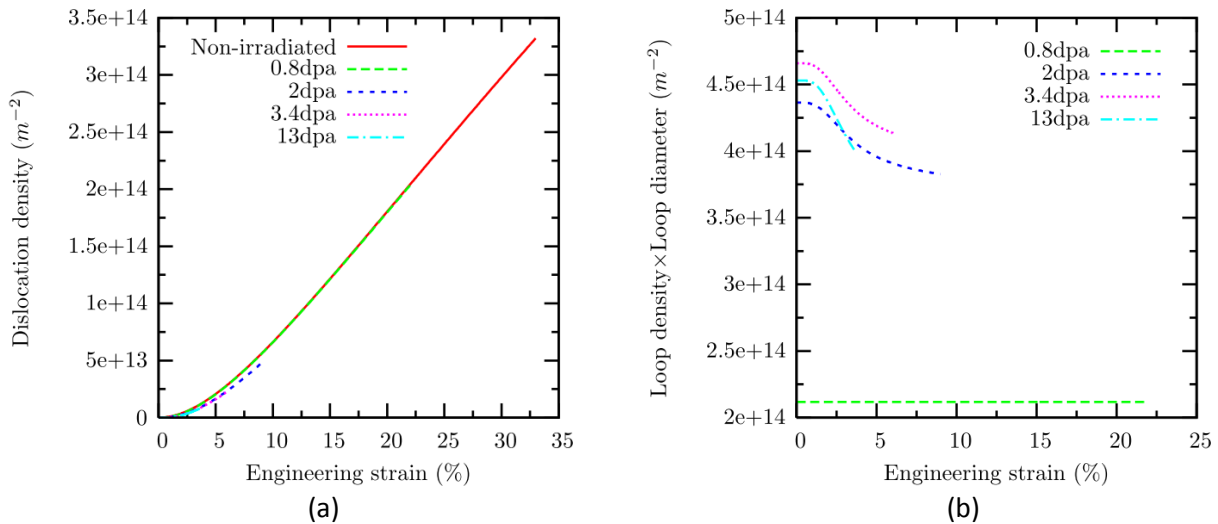


Figure 3.11 : L'évolution de la densité totale de : (a) dislocations, (b) boucles de Frank, en fonction de la déformation macroscopique pour différentes doses.

Etat	$\rho_{Dini}$ ( $m^{-2}$ )	$\rho_{Dfin}$ ( $m^{-2}$ )	$\rho_{Lini}^* \phi_L$ ( $m^{-2}$ )	$\rho_{Lfin}^* \phi_L$ ( $m^{-2}$ )	Taux de balayage des boucles de Frank
Non-irradié	$1 \cdot 10^{10}$	$3.3 \cdot 10^{14}$	-	-	-
0.8dpa	$8.4 \cdot 10^9$	$2.1 \cdot 10^{14}$	$2.1 \cdot 10^{14}$	$2.1 \cdot 10^{14}$	0%
2dpa	$6.8 \cdot 10^9$	$5 \cdot 10^{13}$	$4.4 \cdot 10^{14}$	$3.8 \cdot 10^{14}$	13.6%
3.4dpa	$5.5 \cdot 10^9$	$1 \cdot 10^{13}$	$4.7 \cdot 10^{14}$	$4.2 \cdot 10^{14}$	10.6%
13dpa	$1.9 \cdot 10^9$	$1 \cdot 10^{13}$	$4.5 \cdot 10^{14}$	$4 \cdot 10^{14}$	11%

Tableau 3.11 : Valeurs initiales et finales des densités de dislocations et de boucles de Frank totales.

Les résultats présentés dans la stratégie 3 sont cohérents avec les données expérimentales. Une étude de convergence pour l'état irradié a été réalisée en utilisant les valeurs des paramètres identifiées dans cette stratégie, avec les mêmes maillages utilisés que ceux pour l'état non-irradié (**Tableau 3.6** et **Annexe I. 9**). Les courbes de traction obtenues sont présentées sur la **Figure 3.12**.

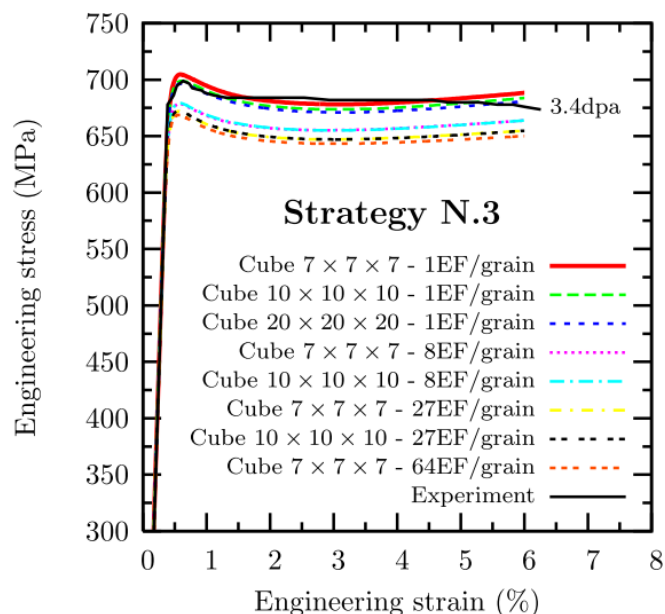


Figure 3.12 : Etude de convergence pour l'état irradié, réalisée avec différents maillages présentés dans le **Tableau 3.6**.

Selon les résultats présentés sur la figure ci-dessus, certains points communs par rapport à l'étude de convergence pour l'état non-irradié sont obtenus :

- les courbes de traction obtenues avec différents nombres de grains aléatoires montrent très peu de différence. Un agrégat polycristallin simplifié avec 343 (7x7x7) grains permet de représenter le nombre suffisant de grains pour obtenir la réponse mécanique macroscopique d'un agrégat polycristallin simplifié avec les orientations cristallographiques aléatoires ;
- une convergence est atteinte pour un grain construit avec au moins 27 éléments.

D'après les observations sur les deux figures (**Figure 3.5** et **Figure 3.12**), l'écroutissage pour l'état irradié semble beaucoup moins sensible au nombre d'éléments par grain que celui pour l'état non-irradié. Par contre, la limite d'élasticité est affectée par le nombre d'éléments par grain, dans le cas d'un matériau irradié. La présence de plus de points de Gauss dans un grain permet de capturer plus facilement l'apparition du glissement plastique, ainsi que l'incompatibilité plastique entre un grain et ses voisins, ce qui conduit à activer les deux mécanismes adoucissants dans notre modèle et donc permet de provoquer des localisations à l'intérieur des grains, dès que le glissement plastique apparaît.

### 3.2.2.5 Identification des paramètres pour l'état irradié – Stratégie 3bis

Afin de vérifier la nécessité de décrire l'effet d'ancrage dans le modèle de « **la somme des racines** », une stratégie complémentaire est mise en place. L'identification des paramètres est effectuée en utilisant le modèle de « **la somme des racines** » sans description de l'effet d'ancrage. Les

données de la microstructure de la littérature [Pokor et al. (2004c)] sont maintenues, et le paramètre  $K_{dl}$  est pris égal à celui obtenu dans la stratégie 3. Les résultats sont présentés dans le **Tableau 3.10**, et les courbes de traction obtenues sont présentées sur la **Figure 3.13**.

	<b>0.8dpa</b>	<b>2dpa</b>	<b>3.4dpa</b>	<b>13dpa</b>
$\alpha_L$	0.21	0.57	0.64	0.72
$K_{dl}$	0.25e-6	0.25e-6	0.25e-6	0.25e-6
$A_L = A_b * \phi_L$	-	$1.12e19 * \phi_L$	$1.12e19 * \phi_L$	$1.12e19 * \phi_L$
$r_L^{sat} = c * r_L^p_{ini}$	$1.0 * r_L^p_{ini}$	$0.37 * r_L^p_{ini}$	$0.36 * r_L^p_{ini}$	$0.39 * r_L^p_{ini}$
$(\rho_L^{sat} \text{ en } m^{-3})$	$(1.0 * \rho_L^p_{ini})$	$(0.37 * \rho_L^p_{ini})$	$(0.36 * \rho_L^p_{ini})$	$(0.39 * \rho_L^p_{ini})$

Tableau 3.12 : Stratégie 3bis : paramètres identifiés pour les matériaux irradiés à différentes doses.

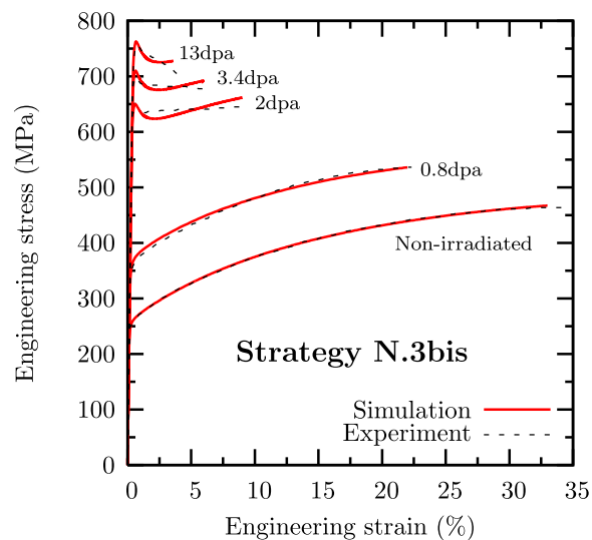


Figure 3.13 : Stratégie 3bis : courbes de traction expérimentales et simulées pour les matériaux non irradié et irradiés à différentes doses.

### Analyse des résultats pour la stratégie 3bis :

Dans la stratégie 3bis, comme présenté dans la stratégie 3, le modèle de « **la somme des racines** » est appliqué. L'effet d'ancrage n'est pas pris décrit. Les données de la microstructure dans la littérature [Pokor et al. (2004c)] sont utilisées lors de l'identification des paramètres. Les conclusions suivantes sont obtenues :

- La valeur du paramètre  $\alpha_L$  augmente beaucoup avec la dose ;
- La valeur du paramètre  $A_L$  ajustée est très grande, ce qui implique que le balayage des boucles est produit très rapidement dès que le glissement plastique dans un grain apparaît ;
- Les valeurs du paramètre  $r_L^{sat}$  restent très petites pour les fortes doses (2dpa, 3.4dpa et 13dpa) ;
- La courbe de traction pour une dose de 0.8dpa est très bien décrite ;
- Un re-durcissement très marqué est présent suite à l'adoucissement, sur les courbes simulées pour les fortes doses (2dpa, 3.4dpa et 13dpa).

Dans le modèle de « **la somme des racines** », le fait de ne pas décrire l'effet d'ancrage et l'adoucissement qui en résulte oblige à introduire un balayage très rapide et très important des boucles de Frank, afin de reproduire l'adoucissement pour les fortes doses. Un re-durcissement est observé après l'adoucissement pour les fortes doses, du fait de la stabilisation de la densité de boucles de Frank et le durcissement par l'augmentation de la densité de dislocations. Les résultats obtenus

dans nos simulations renforcent l'hypothèse du rôle d'effet d'ancrage des dislocations sur le durcissement et l'adoucissement à l'état irradié comme qualitativement indiqué par les simulations à l'échelle inférieure de la DDD.

### 3.3 Applications du modèle cristallin aux calculs de poutres polycristallines

Après avoir identifié les paramètres de la loi cristalline à partir de différentes stratégies détaillées dans la section précédente, une première application est réalisée afin d'évaluer l'effet de structure sur le comportement mécanique simulé.

Les calculs numériques sont faits sur un maillage d'agrégat polycristallin simplifié sous forme de poutre, avec le même type d'élément (c3d20r) que celui utilisé lors de l'identification des paramètres. Une poutre polycristalline contenant 1715 (7x7x35) grains cubiques aléatoires avec un élément par grain est utilisée. Le choix de ce nombre de grains correspond au résultat obtenu présenté dans la **Section 3.2**. Le maillage construit est donnée sur la **Figure 3.14**. Les conditions aux limites et de chargement sont reportées dans le **Tableau 3.13**. Les deux extrémités de la poutre sont encastées et les surfaces latérales sont libres. La vitesse de déformation est imposée à  $3 \cdot 10^{-4} \text{s}^{-1}$ . Le nombre de degrés de liberté de ce maillage est de 25728.

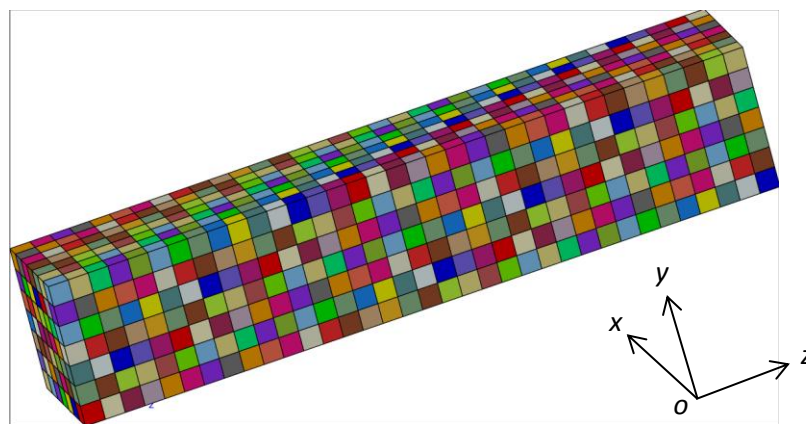


Figure 3.14 : Maillage d'agrégat polycristallin simplifié sous forme de poutre avec 1715 (7x7x35) grains cubiques aléatoires et un élément par grain. Nombre de degrés de liberté total est égal à 25728.

<b>Conditions aux limites</b>	$\{z=0\} : U_x=0 ; \{z=0\} : U_y=0 ; \{z=0\} : U_z=0 ;$ $\{z=1\} : U_x=0 ; \{z=1\} : U_y=0$
<b>Chargement</b>	Déplacement imposé suivant la direction z à la face $\{z=1\}$
<b>Vitesse de déformation</b>	$3 \cdot 10^{-4} \text{s}^{-1}$

Tableau 3.13 : Conditions aux limites et de chargement imposé sur la poutre polycristalline.

#### 3.3.1 Calcul de poutre polycristalline pour l'état non-irradié

Un calcul numérique est tout d'abord réalisé sur la poutre polycristalline en appliquant la loi cristalline avec les paramètres identifiés dans la **Section 3.2.2.1** pour l'état non-irradié. Les courbes de

traction obtenues et la carte d'isovaleurs de  $F_{33}$  dans la poutre déformée au dernier incrément de calcul sont présentées sur la **Figure 3.15**. Une localisation de la déformation macroscopique (la striction) dans la poutre est observée.

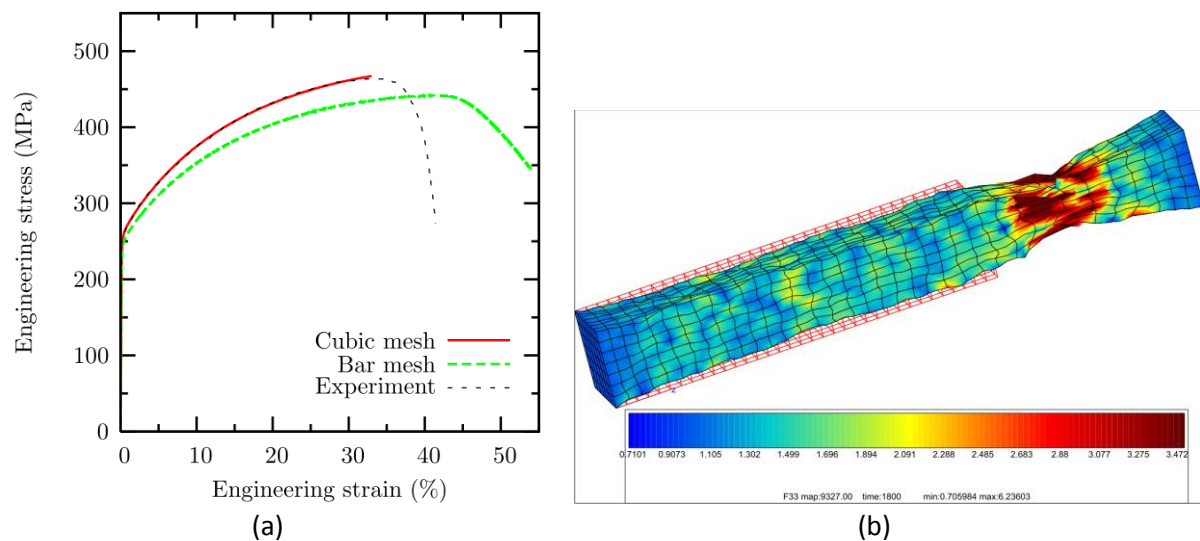


Figure 3.15 : Calcul de structure avec les paramètres de la loi cristalline identifiés pour le matériau non-irradié. (a) courbe de traction obtenue par le calcul de structure (en vert), avec la courbe de traction expérimentale (en noir) et celle obtenue à partir de l'identification sur l'agrégat polycristallin cubique (en rouge). (b) isovaleurs de  $F_{33}$  extrapolées aux nœuds dans la structure déformée, pour une déformation macroscopique de 54%.

D'après les résultats présentés sur la **Figure 3.15**, on peut constater que :

- la limite d'élasticité obtenue par le calcul de poutre est quasiment la même que celle obtenue par l'agrégat polycristallin cubique ;
- l'écrouissage est plus faible dans le calcul de poutre que celui obtenu par l'identification des paramètres (et donc que celui obtenu expérimentalement) ;
- l'apparition de la striction est plus tardive dans le calcul de poutre que celle observée lors de l'essai expérimental.

L'utilisation des conditions aux limites dans le calcul de poutre admet que les surfaces latérales de la poutre se déforment librement, ce qui rapproche des conditions aux limites en contrainte homogène au contour (SUBC). Par contre, les conditions aux limites MPC utilisées pour les calculs d'agrégats polycristallins cubiques sont proches des conditions aux limites en déformation homogène au contour (KUBC). Cette différence permet d'expliquer l'écart observé entre les courbes de traction en vert (vers la borne inférieure) et en rouge (vers la borne supérieure). Le retard de l'apparition de la striction est dû au fait que la tangente à courbe de traction à la fin de l'identification n'est pas tout à fait nulle.

### 3.3.2 Comparaison des calculs de structure pour l'état irradié

Les calculs de poutres sont faits en utilisant les paramètres identifiés à partir des différentes stratégies, afin de comparer la pertinence de l'identification des paramètres pour l'état irradié avec une dose de 3.4dpa. Les courbes de traction ainsi que les cartes d'isovaleurs de  $F_{33}$  dans la poutre déformée à la fin du calcul pour les stratégies 1, 2 et 3 sont présentées respectivement sur les **Figure**

3.16, Figure 3.17 et Figure 3.18. Une localisation de la déformation dans la poutre est observée dans tous les cas étudiés.

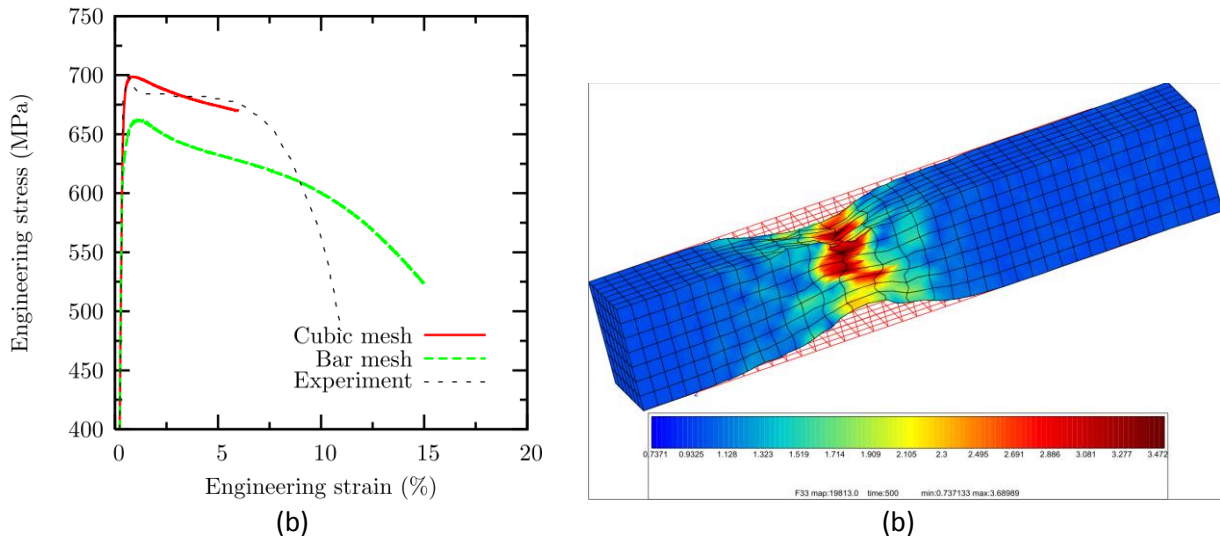


Figure 3.16 : Calcul de structure avec les paramètres de la loi cristalline identifiés pour le matériau irradié à 3.4dpa dans la stratégie 1. (a) courbe de traction obtenue par le calcul de structure (en vert), avec la courbe de traction expérimentale (en noir) et celle obtenue à partir de l'identification sur l'agrégat polycristallin cubique (en rouge). (b) isovaleur de  $F_{33}$  extrapolée aux nœuds dans la structure déformée, pour une déformation macroscopique de 15%.

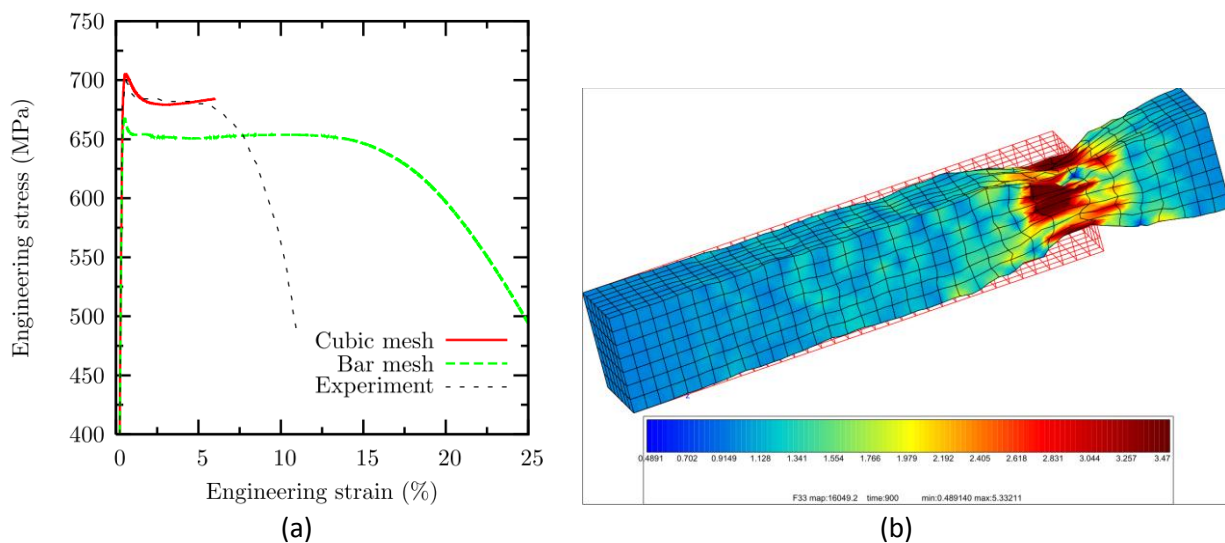


Figure 3.17 : Calcul de structure avec les paramètres de la loi cristalline identifiés pour le matériau irradié à 3.4dpa dans la stratégie 2. (a) courbe de traction obtenue par le calcul de structure (en vert), avec la courbe de traction expérimentale (en noir) et celle obtenue à partir de l'identification sur l'agrégat polycristallin cubique (en rouge). (b) isovaleur de  $F_{33}$  extrapolée aux nœuds dans la structure déformée, pour une déformation macroscopique de 25%.



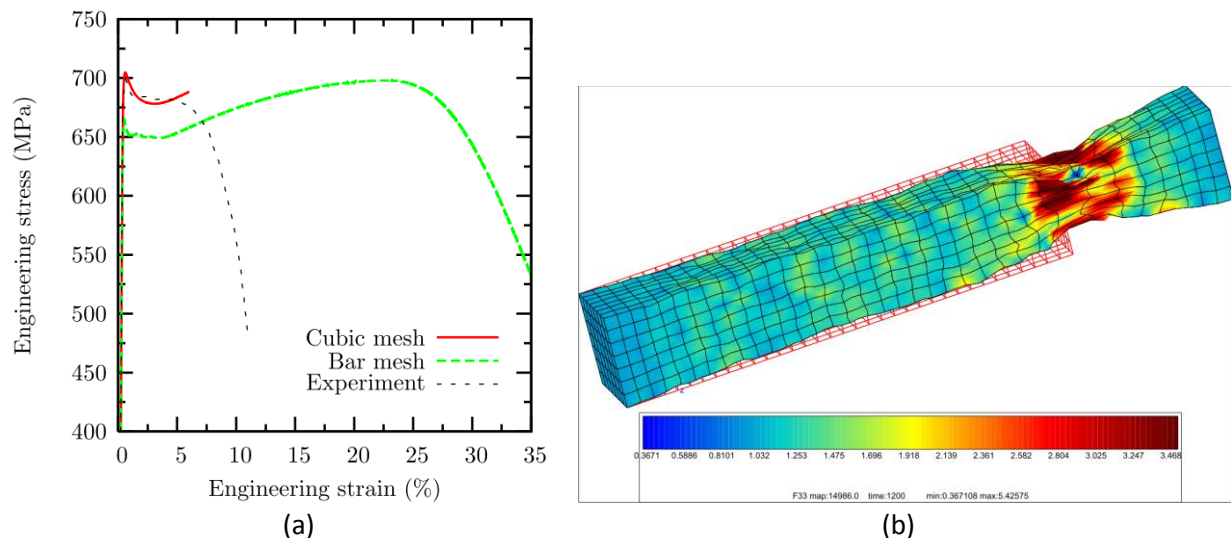


Figure 3.18 : Calcul de structure avec les paramètres de la loi cristalline identifiés pour le matériau irradié à 3.4dpa dans la stratégie 3. (a) courbe de traction obtenue par le calcul de structure (en vert), avec la courbe de traction expérimentale (en noir) et celle obtenue à partir de l'identification sur l'agrégat polycristallin cubique (en rouge). (b) isovaleur de  $F_{33}$  extrapolée aux nœuds dans la structure déformée, pour une déformation macroscopique de 35%.

D'après les résultats présentés ci-dessus, on peut observer que :

- la limite d'élasticité obtenue par le calcul de poutre est inférieure à celle obtenue par l'agrégat polycristallin cubique ;
- Le calcul de poutre correspondant à la stratégie 1 ne permet pas de simuler le plateau observé après la phase d'adoucissement (courbe de traction en vert sur la **Figure 3.16(a)**), et montre une descente continue de la contrainte en désaccord avec l'expérience (courbe de traction en rouge sur la **Figure 3.16(a)**) ;
- Le calcul de poutre correspondant à la stratégie 2 permet de simuler le plateau en contrainte observé après la phase d'adoucissement (courbe de traction en vert sur la **Figure 3.17(a)**). Cependant, le plateau en contrainte simulé est plus long que celui obtenu par l'essai expérimental (courbe de traction en noir sur la **Figure 3.16(a)**),
- Le calcul correspondant à la stratégie 3 peut simuler le plateau observé après la phase d'adoucissement (courbe de traction en vert sur la **Figure 3.18(a)**). Par contre, un sur-écrouissage notable est observé avant l'apparition de la striction, car la loi de comportement identifiée conduit à un re-durcissement trop important après la phase d'adoucissement contrairement à ce qui est observé expérimentalement.

Comme ce qui a été interprété dans la dernière section concernant le calcul de poutre pour le matériau non-irradié, la différence des conditions aux limites utilisée est l'une des causes qui provoque l'écart observé entre les courbes de traction obtenues par les calculs de poutres et par l'identification, pour le matériau irradié à 3.4dpa. De plus, les conditions aux limites appliquées aux calculs de poutres favorisent la localisation de la déformation par les deux mécanismes adoucissants. Les lois de comportement identifiées dans les stratégies 2 et 3 montrent un retard de l'apparition de la striction dû au sur-écrouissage après la phase d'adoucissement.

### 3.4 Bilan et conclusions partielles

Les modèles de « **la racine de la somme** » et de « **la somme des racines** » présentés dans le **Chapitre 2** sont appliqués lors de l'identification des paramètres. Du fait du manque de données expérimentales (courbes de traction et données microstructurales) sur les monocristaux de l'acier 304 autour de 300°C et surtout pour l'état irradié, les courbes de traction expérimentales de la littérature [Pokor et al. (2004c)] pour l'acier 304L hypertrempé aux états non-irradié et irradié à différents niveaux à 330°C avec les données de la microstructure correspondantes à chaque dose sont retenues pour identifier par simulation inverse les paramètres de la loi cristalline.

L'identification des paramètres de la loi cristalline est effectuée sur un maillage d'agrégat polycristallin simplifié, avec 343 grains cubiques et un seul élément fini par grain. Les conditions aux limites MPC sont appliquées sur les faces latérales afin de réduire au maximum l'effet de structure, et donc la localisation de la déformation. Les paramètres pour l'état non-irradié sont tout d'abord identifiés et validés. Après l'identification des valeurs des paramètres pour le matériau non-irradié, différentes stratégies sont employées pour identifier les paramètres de la loi cristalline pour les matériaux irradiés à différentes doses. Ces différentes stratégies résultent du manque de consensus sur les mécanismes physiques à l'origine du durcissement et de l'adoucissement dans les aciers austénitiques inoxydables irradiés.

Deux formalismes pour décrire l'érouissage sont testés : le modèle de « **la racine de la somme** » et celui de « **la somme des racines** ». L'identification des paramètres du modèle « **la racine de la somme** » (*resp.* modèle « **la somme des racines** ») est présenté dans les stratégies 1 et 2 (*resp.* stratégies 3 et 3bis). Etant donné que la densité de dislocations est très inférieure à la densité de boucles de Frank, le modèle « **la racine de la somme** » sans description de l'effet d'ancrage ne permet pas de représenter correctement le comportement du matériau irradié à 0.8dpa. D'après les travaux de la DDD tri-dimensionnelle réalisés par C. Robertson au sein du CEA [Tanguy et al. (2012)], une sous-estimation de l'effet de durcissement par les boucles de Frank a été observée. Le balayage des boucles de Frank d'un point de vue macroscopique au sein de l'agrégat polycristallin ne dépasserait pas 15% dans un matériau irradié. La vitesse de balayage des boucles de Frank augmente avec la dose avant d'atteindre une saturation dont le niveau dépend également de la dose. De plus, une évolution du mécanisme de durcissement a probablement lieu entre une faible dose (*e.g.* 0.8dpa) et une dose plus élevée (*e.g.*  $\geq 2$ dpa). Inspiré par les travaux de la littérature [Trinka et al. (1997a), Singh et al. (1997) et Trinka et al. (1997b)], l'ajout d'un effet d'ancrage des dislocations permet de représenter phénoménologiquement le mécanisme de durcissement par blocage des sources induites par les cascades. Ce mécanisme d'ancrage des dislocations peut être considéré comme un facteur important du durcissement et de l'adoucissement pour les fortes doses. En appliquant le modèle « **la somme des racines** » en présence de l'effet d'ancrage des dislocations, les courbes de traction expérimentales et simulées montrent un bon accord pour les matériaux irradiés à tous les niveaux d'irradiation. Cependant, un re-durcissement est observé après la phase d'adoucissement pour les fortes doses (2dpa, 3.4dpa et 13dpa), ce qui provoquera potentiellement une apparition différée de la striction sur un calcul de structure complet.

D'après les résultats des simulations, la présence de l'effet d'ancrage des dislocations conduit aux conséquences suivantes sur le comportement mécanique :

- **Durcissement** du matériau fortement irradié par ancrage des dislocations par les amas de défauts ponctuels créés par les cascades. Une contrainte critique  $\tau_a$  doit être fournie pour débloquer les dislocations décorées. Cette contrainte augmente avec la dose, jusqu'à atteindre une saturation.
- **Adoucissement** du matériau fortement irradié suite au glissement plastique. Il joue un rôle important sur l'adoucissement du matériau donc sur l'apparition du pic sur la courbe de traction. Sa vitesse de dispersion dépend du paramètre  $\gamma_0$  qui est fixé à une valeur très faible ( $\gamma_0 = 0.005$ ) dans notre identification, ce qui permet d'avoir un adoucissement brutal dû à l'effet d'avalanche.

Compte tenu des courbes de traction simulées et les valeurs des paramètres identifiées de la loi cristalline, la stratégie 3 correspond le mieux à notre attente.

Par ailleurs, une étude de convergence est effectuée basée sur les courbes de traction simulées pour le matériau non-irradié et pour le matériau irradié à 3.4dpa dans la stratégie 3. D'après les résultats obtenus, un maillage d'agrégat polycristallin simplifié contenant 343 (7x7x7) grains cubiques avec 27 (3x3x3) éléments finis par grain permet de représenter un VER. Par contre, l'utilisation de ce maillage pour identifier les paramètres de la loi cristalline complexe sera très coûteuse en temps de calcul. L'augmentation du nombre d'éléments par grain permet d'observer :

- Une diminution du taux d'érouissage avec le maintien de la limite d'élasticité pour l'état non-irradié.
- Une diminution de la limite d'élasticité avec le maintien du taux d'érouissage pour l'état irradié.

La cause des différences observées par ces analyses de convergence pour les matériaux non-irradié et irradié n'est pas complètement identifiée, mais on peut penser que les deux facteurs adoucissants – le balayage des boucles de Frank et l'effet d'avalanche résultant du désancrage des dislocations – jouent un rôle principal dans la diminution de la limite d'élasticité pour l'état irradié.

Les calculs de structure simplifiée sont réalisés sur un maillage d'agrégat polycristallin sous forme de poutre, pour les matériaux non-irradié et irradié à 3.4dpa. D'après les résultats obtenus, un effet de structure est observé dans tous les cas étudiés. Les différentes conditions aux limites utilisées sont l'une des causes qui provoque un écart observé entre les courbes de traction obtenues par les calculs de poutres et par l'identification. De plus, la présence des deux mécanismes adoucissants conduit plus facilement à une localisation de la déformation, avec les conditions aux limites appliquées aux calculs de poutre, pour le matériau irradié. Un retard de l'apparition de la striction est observé pour l'état non-irradié à cause de la tangente non nulle à courbe de traction à la fin de l'identification. Les lois de comportement identifiées pour le matériau irradié dans les stratégies 2 et 3 montrent un retard de l'apparition de la striction dû au sur-érouissage après la phase d'adoucissement.

Afin d'améliorer les calculs de poutres pour que les résultats soient plus proches de ceux identifiés, un maillage avec plus de grains et plus d'éléments par grain dans la section et aussi dans la longueur est envisagé. Pour comparer les résultats obtenus par les simulations et par les essais de traction, il faut réaliser des calculs de structure avec la géométrie d'une vraie éprouvette. Cependant, ce type de calcul n'est pas réaliste dans notre étude. Par ailleurs, l'utilisation des conditions aux limites périodiques sur un VER permet également d'améliorer le résultat des calculs de poutres.

# Chapitre 4 : Développement d'un modèle monocristallin poreux

Le modèle monocristallin développé et validé dans le **Chapitre 2** et le **Chapitre 3** nous permet de simuler le comportement mécanique des aciers inoxydables austénitiques non-endommagés. Son utilisation est donc limitée car les matériaux fortement irradiés présentent souvent des cavités intragranulaires (**Section 1.2.3.3**). Pour intégrer l'effet de la porosité, on a besoin de développer un modèle monocristallin poreux.

Le présent chapitre est consacré au développement et à la validation d'un modèle de plasticité pour un monocristal poreux. Dans un premier temps, un critère de plasticité pour un monocristal poreux est développé analytiquement puis validé par les simulations numériques sur une cellule monocristalline poreuse, afin d'étudier le comportement d'un monocristal poreux. Dans un deuxième temps, le modèle monocristallin poreux est implémenté dans le code de calcul ZéBuLoN, ce qui permet d'homogénéiser les monocristaux en présence des cavités intragranulaires. Ce travail a fait l'objet d'une soumission de publication dans la revue « International Journal of Solids and Structures ».

## 4.1 Introduction aux modèles d'endommagement ductile

On présente ici brièvement les différents modèles permettant de modéliser la rupture ductile des matériaux. A l'opposé des matériaux fragiles, dont la rupture est caractérisée par une propagation très rapide des fissures en l'absence de déformation plastique macroscopique, les matériaux ductiles présentent progressivement un endommagement associé à une déformation plastique importante. Les principales étapes de la rupture ductile sont la nucléation, la croissance et la coalescence des cavités qui conduit à la rupture finale du matériau.

A partir des premiers travaux réalisés dans les années 60 [McClintock (1968) et Rice et Tracey (1969)], Gurson [Gurson (1977)] a proposé en premier une approche micromécanique à partir d'une analyse limite permettant d'obtenir la surface de charge macroscopique d'un milieu poreux avec une matrice rigide parfaitement plastique obéissant au critère de von Mises, en fonction de la fraction volumique d'une cavité sphérique. Ce modèle présente un fort couplage entre la déformation et l'endommagement. L'expression du critère de plasticité est donnée par :

$$\Phi = \frac{\sigma_{eq}^2}{\sigma_0^2} + 2f \cosh\left\{\frac{3\sigma_m}{2\sigma_0}\right\} - 1 - f^2 = 0 \quad \text{Équation 4.1}$$

où  $\sigma_{eq}$  et  $\sigma_m$  présentent respectivement la contrainte équivalente macroscopique de von Mises et la contrainte hydrostatique (la trace du tenseur des contraintes),  $\sigma_0$  est la limite d'écoulement plastique et  $f$  est la porosité.

Le modèle original de Gurson a été progressivement modifié et enrichi, soit de manière phénoménologique, soit de manière théorique, pendant ces trente dernières années, afin d'obtenir une meilleure description de sa formulation. Ici, on présente quelques-uns de ces modèles dont le formalisme pourra nous servir pour développer notre modèle monocristallin poreux présenté dans la section suivante.

- **Modèle de GTN** [Tvergaard et Needleman (1984)] : ce modèle propose une amélioration basée sur la simulation numérique [Tvergaard (1981)] en introduisant 2 coefficients différents  $q_1$  et  $q_2$ . La contrainte équivalente d'écoulement  $\sigma^*$  est utilisée au lieu de la limite d'écoulement  $\sigma_0$ , afin de prendre en compte l'écrouissage du matériau poreux. De plus, pour prédire plus correctement la rupture finale du matériau, le modèle GTN introduit également une porosité effective  $f^*$  permettant de modéliser la phase de coalescence des cavités à partir d'une porosité critique  $f_c$  :

$$\Phi = \frac{\sigma_{eq}^2}{\sigma^{*2}} + 2q_1 f^* \cosh\left\{\frac{3}{2}q_2 \frac{\sigma_m}{\sigma^{*2}}\right\} - 1 - (q_1 f^*)^2 = 0 \quad \text{Équation 4.2}$$

avec  $f^*(f) = \begin{cases} f & \text{si } f \leq f_c \\ f_c + \delta(f - f_c) & \text{si } f > f_c \end{cases}$ ,  $\delta = \frac{f_u - f_c}{f_f - f_c}$ . La porosité correspondant à la rupture finale du

matériau est  $f_f$  pour laquelle  $f^*(f_f) = f_u = 1/q_1$ .

- **Modèle de Ponte-Castañeda-Suquet** [Ponte-Castañeda (1991) et Suquet (1992)] : ce modèle présente une borne inférieure de Hashin et Shtrikman au comportement non-linéaire en appliquant l'approche variationnelle, qui permet de mieux prédire le seuil de plastification dans les cas d'une faible triaxialité des contraintes (le rapport entre la contrainte hydrostatique et la contrainte équivalente) ou même sous chargement purement déviatorique ( $\sigma_m = 0$ ) par rapport au modèle de Gurson :

$$\Phi = \left(1 + \frac{2}{3}f\right) \frac{\sigma_{eq}^2}{\sigma^{*2}} + \frac{9}{4}f \frac{\sigma_m^2}{\sigma^{*2}} - (1-f)^2 = 0 \quad \text{Équation 4.3}$$

- **Modèle de Leblond-Perrin-Suquet** [Leblond et al. (1994)] : il s'agit d'une extension phénoménologique du modèle de Gurson en combinant le critère présenté dans l'Équation 4.3, pour que le critère proposé puisse donner des bonnes solutions analytiques sous chargements hydrostatique ( $\sigma_{eq} = 0$ ) et déviatorique ( $\sigma_m = 0$ ) :

$$\Phi = \left(1 + \frac{2}{3}f\right) \frac{\sigma_{eq}^2}{\sigma^{*2}} + 2f \cosh\left\{\frac{3\sigma_m}{2\sigma^*}\right\} - 1 - f^2 = 0 \quad \text{Équation 4.4}$$

- **Modèle de Monchiet-Charkaluk-Kondo** [Monchiet et al. (2007)] : Le critère a été développé par l'utilisation de champs tests de vitesse de type Eshelby. Pour les faibles contraintes hydrostatiques  $\sigma_m$ , le développement limité d'ordre 1 du terme cosinus hyperbolique permet de retrouver la même expression que celle donnée dans l'Équation 4.3 :

$$\Phi = \frac{\sigma_{eq}^2}{\sigma^{*2}} + 2f \cosh \left\{ \frac{1}{\sigma^*} \sqrt{\frac{9}{4} \sigma_m^2 + \frac{2}{3} \sigma_{eq}^2} \right\} - 1 - f^2 = 0 \quad \text{Équation 4.5}$$

- **Modèle de Benzerga-Besson** [Benzerga et Besson (2001)] : Différent des modèles présentés ci-dessus concernant les critères de plasticité d'un milieu poreux obéissant au critère de von Mises, le modèle de Benzerga-Besson permet de modéliser la surface de charge d'un matériau poreux orthotrope régi par le critère de Hill, en prenant en compte l'anisotropie plastique dans les équations constitutives :

$$\Phi = \frac{\sigma_{eq}^2}{\sigma^{*2}} + 2f \cosh \left\{ \frac{\sqrt{3}}{2h_m} \frac{\sigma_m}{\sigma^*} \right\} - 1 - f^2 = 0 \quad \text{Équation 4.6}$$

avec  $h_m$  le facteur d'anisotropie de la forme  $h_m = \left[ \frac{1}{4} \frac{h_1 + h_2 + 4h_3}{h_1h_2 + h_2h_3 + h_3h_1} + \frac{1}{2h_6} \right]$ ,  $h_i$  les coefficients de Hill.

Afin de compléter le modèle de type Gurson, en appliquant la loi de normalité de l'écoulement plastique pour le matériau poreux, le tenseur taux de déformation plastique macroscopique effective s'écrit  $\underline{\dot{\epsilon}}_p = \Lambda \partial \Phi / \partial \underline{\sigma}$ , avec  $\Lambda$  le multiplicateur plastique macroscopique [Gurson (1977)]. L'évolution de la déformation plastique effective  $p$  est donnée par l'équivalence des dissipations plastiques macroscopique effective du matériau poreux et microscopique de la matrice :

$$\underline{\sigma} : \underline{\dot{\epsilon}}_p = (1-f) \sigma^* \dot{p} \quad \text{Équation 4.7}$$

L'évolution de la porosité due à la croissance des cavités s'exprime par  $\dot{f} = (1-f) \text{trace}(\underline{\dot{\epsilon}}_p)$ , en négligeant la partie élastique et en appliquant le principe de conservation de la masse.

Cependant, aucun des modèles présentés précédemment ne permet de représenter le comportement d'un monocristal poreux, car l'anisotropie complexe due à la cristallographie ne peut pas être décrite par le critère de von Mises, ni par le critère de Hill. De ce fait, il est nécessaire de développer un modèle permettant de modéliser explicitement le comportement macroscopique d'un monocristal poreux.

## 4.2 Proposition d'un critère de plasticité pour un monocristal poreux

Cette section présente le développement d'un critère de plasticité pour un monocristal poreux, en tenant compte de différents facteurs influençant le comportement macroscopique du matériau : l'orientation cristallographique, la triaxialité et la porosité.

Ce travail s'appuie sur le travail préliminaire effectué dans la thèse de S. Bugat [Bugat (2000)], qui propose une estimation permettant de réaliser une homogénéisation d'un monocristal visqueux non linéaire poreux. Cette approche consiste à estimer le potentiel du monocristal linéaire poreux de

comparaison, inspirée par l'application de l'approche variationnelle de type Hashin-Shtrikman [Debotton (1995)]. Nous adoptons un modèle de type Gurson en introduisant 3 coefficients  $\alpha$ ,  $q_1$  et  $q_2$ , qui sont ajustés à partir des calculs numériques réalisés sur une cellule monocristalline tridimensionnelle parfaitement plastique contenant une cavité sphérique au milieu de la cellule.

D'après les résultats obtenus, on peut conclure que le critère de plasticité développé est capable de prédire la surface de charge d'un monocristal poreux pour des triaxialités comprises entre 0 et l'infini, en tenant compte des effets des directions du chargement principal et secondaire, ainsi que l'effet de la porosité pour une gamme comprise entre 0.005 et 0.1. Ce travail est décrit dans un article qui a été soumis à « International Journal of Solids and Structures » et qui est présenté ci-dessous.

## A yield function for single crystals containing voids

X. Han<sup>a,b,\*</sup>, J. Besson<sup>a</sup>, S. Forest<sup>a</sup>, B. Tanguy<sup>b</sup>, S. Bugat<sup>c</sup>

<sup>a</sup>*Centre des Matériaux, Mines ParisTech, UMR CNRS 7633, BP 87, 91003 Evry cedex, France*

<sup>b</sup>*Laboratoire de Comportement mécanique des Matériaux Irradiés, CEA Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette cedex, France*

<sup>c</sup>*Département SI Finances-Gestion Groupe EDF, 75000 Paris, France*

---

### Abstract

A yield function for single crystals containing voids has been developed based on a variational approach. This first yield function is phenomenologically extended by modifying the dependence on the mean stress and introducing three adjustable parameters. Unit cell finite element calculations are performed for various stress triaxiality ratios, main loading directions and porosity levels in the case of a perfectly plastic FCC single crystal. The three model parameters are adjusted on the unit cell calculations so that a very good agreement between simulation results and the proposed model is obtained.

*Keywords:* Porous media, Single crystal, Variational approach, Yield criterion, Unit cell model

---

### 1. Introduction

In crystalline metals, void nucleation, growth and coalescence lead to ductile fracture. Since the last forty years, building on the earliest works by Mc Clintock (1968), Rice and Tracey (1969), and Gurson (1977), much effort has been made to improve the prediction of damage evolution and fracture of porous ductile materials at macro and mesoscopic scales. The role of various characteristic features such as porosity, viscoplasticity, void shape, plastic anisotropy of the matrix has been studied. Some reviews were recently provided by Pineau and Pardoën (2007), Besson (2010), Benzerga and Leblond (2010). Two main approaches have been proposed to develop models for ductile damage growth. The first one is based on the seminal work by Gurson (1977) which uses an upper bound approach, following Tvergaard and Needleman (1984), Gologanu and Leblond (1993), Leblond et al. (1994), Benzerga and Besson (2001), Monchiet et al. (2007), Monchiet et al. (2008). The second approach is based on variational formulation of the homogenization theory using the concept of linear-comparison material, see Ponte Castañeda (1991), DeBotton and Ponte Castañeda (1995), Liu et al. (2005), Danas and Ponte Castañeda (2009) and Lebensohn et al. (2011).



Theoretical results obtained following these approaches can be verified using unit cell calculations first introduced in the pioneering work by Koplik and Needleman (1988). This versatile methodology allows to easily study the effect of various parameters on void growth and coalescence such as hardening rate (Faleskog et al., 1998, Gao et al., 1998, Lecarme et al., 2011), void shape or cell shape (Pardoën and Hutchinson, 2000), void population (Faleskog and Shih (1997), Fabrègue and Pardoën (2008) and Fritzen et al. (2012)), void distribution (Bandstra and Koss, 2008), and second phase particles (Steglich and Brocks, 1997, Steglich et al., 1999).

The effect of the anisotropy of matrix behaviour on void growth was investigated in relation to the anisotropic plastic properties of metal sheets, see in particular (Benzerga et al., 2004) and more recently (Monchiet et al., 2008). Typically, a Hill-type yield criterion was assumed for the matrix in the latter references. The situation is quite different in the presence of voids embedded in a single crystalline matrix. The case of single crystals containing voids (hereafter referred to as porous single crystals) has only been studied recently using the unit cell methodology either based on FE simulations (Schacht et al. (2003), Yerra et al. (2010), Ha and Kim (2010)), or based on slip line theory in the case of simple cylindrical voids (Kysar et al. (2005), Gan et al. (2006), Gan and Kysar (2007)). Besides, the analysis of ductile fracture in single crystals has been performed at smaller scales for nano and micro-voids by means of Discrete Dislocations Dynamics in (Huang et al. (2007), Hussein et al. (2008), Segurado and Llorca (2009), Segurado and Llorca (2010) and Huang et al. (2012)), and Molecular Dynamics in (Potirniche et al. (2006), Zhao et al. (2009), Traiviratana et al. (2008), Tang et al. (2010b) and Tang et al. (2010a)). However a set of constitutive equations describing the overall behaviour of porous single crystals is still lacking in the literature. The previously mentioned papers do not provide an overall yield function for porous single crystals. There is currently a real need for such a yield function that would be simple enough to allow straightforward Finite Element implementation for carrying out structural computations of ductile fracture in single and poly-crystals. It could be used for instance to reproduce experimental facts showing accelerated anisotropic growth of cavities in single crystals as observed in Crépin et al. (1996).

The purpose of the present work is to develop a model to describe the yield function of porous single crystals. Such models could be used to represent ductility of stainless steel (304/316 series) used for core internals of Fast Breeder Reactor and PWR nuclear power plants in which intragranular voids develop and lead to the phenomenon of swelling due to high irradiation levels (Foster and Strain (1974), Seran et al. (1984), Dubuisson (2011) and Renault et al. (2011)), also that of Ni based single crystal superalloys used in turbo-engines components (Wang et al., 2006). The model is theoretically motivated using a micromechanical analysis based on the variational approach by (Ponte Castañeda and Suquet, 1998). It is extended on a phenomenological basis to match trends obtained for rate-independent material (e.g. Gurson-Tvergaard-Needleman model). Unit

cell calculations are used to adjust and validate the model. Various loading directions and porosity levels (from 0.5% to 10%) are used.

The single crystal constitutive framework is recalled in section 2.1. The proposed yield function for porous single crystal is presented in section 2.2. The section 3 is dedicated to the identification methodology of the corresponding material parameters from unit cell computations. The results and validation of the approach are provided in section 4 in terms of crystal orientation, loading conditions and void volume fraction. The micromechanical motivation of the model is explained in Appendix A.

## 2. Proposed model for porous single crystals

The analysis given in this paper is limited to the small deformation framework, as it is the case in standard limit analysis.

### 2.1. Model for the single crystal matrix

In this work, which essentially deals with yielding of porous single crystals, a very simple law is used to describe the constitutive behaviour of the single crystal matrix. For each slip system  $s = 1 \dots N$ , the resolved shear stress,  $\tau_s$  is expressed as:

$$\tau_s = \underline{\sigma} : \underline{m}_s \quad \text{with} \quad \underline{m}_s = \frac{1}{2} \left( \vec{l}_s \otimes \vec{n}_s + \vec{n}_s \otimes \vec{l}_s \right) \quad (1)$$

where  $\underline{\sigma}$  is the Cauchy stress tensor acting on the single crystal volume element.  $\vec{l}_s$  and  $\vec{n}_s$  are the unit vectors along the slip direction of the slip system  $s$  and normal to the slip plane, respectively. The total number of slip systems is  $N$ . For each slip system a yield surface can be defined as:

$$\psi_s = |\tau_s| - \tau_0 \quad (2)$$

Provided that  $\psi_s \geq 0$ , the slip rate for each slip system  $s$  is given as:

$$\dot{\gamma}_s(\tau_s) = \dot{\gamma}_0 \left( \frac{\psi_s}{\tau_0} \right)^n = \dot{\gamma}_0 \left( \frac{|\tau_s| - \tau_0}{\tau_0} \right)^n \quad (3)$$

where  $\dot{\gamma}_0$ ,  $\tau_0$  and  $n$  are material parameters.  $\tau_0$  represents the critical resolved shear stress (CRSS) of the slip system. For the sake of simplicity each slip system is assumed to have the same CRSS but the model presented here can be easily extended in order to take into account different CRSS as well as self and cross hardening. Using the normality rule, the plastic strain rate tensor,  $\dot{\underline{\epsilon}}_p$ , is expressed as:

$$\dot{\underline{\epsilon}}_p = \sum_s \dot{\gamma}_s \frac{\partial \psi_s}{\partial \underline{\sigma}} = \sum_s \dot{\gamma}_s \text{sign}(\tau_s) \underline{m}_s \quad (4)$$

## 2.2. Model for the porous single crystal

One considers here a single crystal containing spherical voids. The void volume fraction is referred to as  $f$  in the following. Based on the variational formulation proposed by Ponte Castañeda and Suquet (1998), it is shown in Appendix A that an effective scalar resolved stress acting on each slip system  $\tau_s^*(\underline{\sigma}, f)$  can be defined as a function of the applied stress and the porosity level, such that:

$$\tau_s^* - \frac{1}{1-f} \left( \tau_s^2 + \frac{2}{45} f \sigma_{eq}^2 + \frac{3}{20} f \sigma_m^2 \right)^{\frac{1}{2}} \stackrel{\text{def. } \tau_s^*}{=} 0 \quad (5)$$

where  $\sigma_m$  (resp.  $\sigma_{eq}$ ) is the mean stress (resp. von Mises stress) of the macroscopic stress tensor  $\underline{\sigma}$ .  $\tau_s^{*2}$  is expressed as a quadratic form of  $\underline{\sigma}$ . Note that the notations used here for the overall yield functions are different from those in Appendix A: Small letters are used for the stress and strain quantities instead of capital letters, because there is no reference any more to the micromechanical variational analysis. Similar yield functions were obtained in the case of a voided solid made of an isotropic von Mises matrix (Leblond et al., 1994). The quadratic dependence in (5) is known to be inadequate in the case of plastic solids since the seminal works of Mc Clintock (1968) and Rice and Tracey (1969). An exponential dependence on the mean stress should be preferred. Using the second order Taylor expansion of  $\cosh(x) = 1 + \frac{1}{2}x^2$ , other definitions of the effective scalar resolved stress  $\tau_s^*$  can be proposed so that it better corresponds to models derived from the Gurson (1977) model. Following the concept of a scalar stress measure (Besson et al., 2001), which can be explicitly or implicitly defined, another expression for  $\tau_s^*$  can be worked out from the following expression which takes into account the mean stress dependence as in Gurson type models:

$$\left( \frac{\tau_s^2}{\tau_s^{*2}} + \frac{2}{45} f \frac{\sigma_{eq}^2}{\tau_s^{*2}} \right) + 2f \cosh \left( \sqrt{\frac{3}{20}} \frac{\sigma_m}{\tau_s^*} \right) - 1 - f^2 \stackrel{\text{def. } \tau_s^*}{=} 0 \quad (6)$$

$\tau_s^*$  is found by solving this equation. Another solution, based on the recent development by Monchiet et al. (2007) would be to define  $\tau_s^*$  based on the following equation:

$$\frac{\tau_s^2}{\tau_s^{*2}} + 2f \cosh \left( \sqrt{\frac{3}{20} \frac{\sigma_m^2}{\tau_s^{*2}} + \frac{2}{45} \frac{\sigma_{eq}^2}{\tau_s^{*2}}} \right) - 1 - f^2 \stackrel{\text{def. } \tau_s^*}{=} 0 \quad (7)$$

In the following the Gurson-like formulation will be used (Eq. 6). It is however well known that the original Gurson (1977) model could not well represent the behaviour of actual voided cells as simulated using finite element calculations (Brocks et al. (1995), Kuna and Sun (1996) and Fritzen et al. (2012)) so that empirical modifications have to be introduced to better represent the cell behaviour (Tvergaard and Needleman (1984) and Faleskog et al. (1998)). Accordingly, the following definition for  $\tau_s^*$  is proposed:

$$\left( \frac{\tau_s^2}{\tau_s^{*2}} + \alpha \frac{2}{45} f \frac{\sigma_{eq}^2}{\tau_s^{*2}} \right) + 2q_1 f \cosh \left( q_2 \sqrt{\frac{3}{20} \frac{\sigma_m}{\tau_s^*}} \right) - 1 - q_1^2 f^2 \stackrel{\text{def. } \tau_s^*}{=} 0 \quad (8)$$

where  $\alpha$ ,  $q_1$  and  $q_2$  are parameters that need to be adjusted.  $q_1$  and  $q_2$  play a similar role as in the work by Tvergaard and Needleman (1984) whereas  $\alpha$  is a new parameter weighting the relative contribution of the resolved shear stress on each slip system and the usual isotropic equivalent von Mises stress measure. The identification of these parameters will be done in the following based on unit cell simulations of voided single crystals. In all cases,  $\tau_s^* = |\tau_s|$  for  $f = 0$  so that the yield surface of the single crystal matrix is retrieved.

For each slip system, the yield surface is then defined as:

$$\psi_s^* = \tau_s^* - \tau_0 \geq 0 \quad (9)$$

The plastic strain rate tensor is still expressed using the normality rule as:

$$\dot{\underline{\epsilon}}_p = (1 - f) \sum_s \dot{\gamma}_s \frac{\partial \psi_s^*}{\partial \underline{\sigma}} = (1 - f) \sum_s \dot{\gamma}_s \frac{\partial \tau_s^*}{\partial \underline{\sigma}} \quad (10)$$

where  $\dot{\gamma}_s$  is obtained as a function of  $\tau_s^*$  using Eq. 3 as:

$$\dot{\gamma}_s(\tau_s) = \dot{\gamma}_0 \left( \frac{\psi_s^*}{\tau_0} \right)^n = \dot{\gamma}_0 \left( \frac{\tau_s^* - \tau_0}{\tau_0} \right)^n \quad (11)$$

Whatever the chosen definition (Eqs. 5, 6, 7 or 8), the effective stress  $\tau_s^*$  is an homogeneous function of  $\underline{\sigma}$  of degree 1 and differentiable so that (Euler's theorem):  $\partial \tau_s^* / \partial \underline{\sigma} : \underline{\sigma} = \tau_s^*$ . The plastic dissipation is obtained as:

$$\dot{\underline{\epsilon}}_p : \underline{\sigma} = (1 - f) \sum_s \dot{\gamma}_s \frac{\partial \tau_s^*}{\partial \underline{\sigma}} : \underline{\sigma} = (1 - f) \sum_s \dot{\gamma}_s \tau_s^* \geq 0 \quad (12)$$

which expresses the equality between the plastic work at the macroscopic level (left-hand side) and the microscopic level (right-hand side). The factor  $(1 - f)$  on the right-hand side corresponds to the volume fraction occupied by the single crystal matrix in which a power equal to  $\sum_s \dot{\gamma}_s \tau_s^*$  is dissipated.

### 3. Model parameter determination based on finite element analysis

In this section, the proposed model (Eq. 8) will be tested and adjusted. Finite element calculations of voided unit cells are carried out. The adjustable model parameters ( $\alpha$ ,  $q_1$  and  $q_2$ ) will be identified to represent unit cell calculations results. In this work Face-Centered Cubic (FCC) single crystals are considered. In this highly-symmetric crystalline structure, plastic slip occurs on a group of 12 slip systems following  $\{111\}\langle 110 \rangle$  (see Tab. 1). Eq. 11, which relates the slip rate to the effective resolved stress, can be rewritten as:

$$\tau_s^* - \tau_0 - \tau_0 \left( \frac{\dot{\gamma}_s}{\dot{\gamma}_0} \right)^{\frac{1}{n}} = 0 \quad (13)$$

Slip system $s$	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
Slip plane $\vec{n}$		(111)		( $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ )			( $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ )			(111)		
Slip direction $\vec{l}$	$[\bar{1}01]$	$[0\bar{1}1]$	$[\bar{1}10]$	$[\bar{1}01]$	$[011]$	$[110]$	$[0\bar{1}1]$	$[110]$	$[101]$	$[\bar{1}10]$	$[101]$	$[011]$

Table 1: Slip systems in FCC single crystals

In the limiting case of a nearly perfectly plastic behaviour, which is used in this study, calculations are performed such that the viscous stress is less than 1% of the CRSS:

$$\tau_0 \left( \frac{\dot{\gamma}_s}{\dot{\gamma}_0} \right)^{\frac{1}{n}} < 1\% \times \tau_0 \quad (14)$$

within the usual range of imposed strain rates for engineering materials.

The material parameters for a FCC single crystal used for the unit cell analysis are given in Tab. 2. The elastoviscoplastic crystal plasticity model based on Schmid's law with a threshold requires the choice of elasticity moduli. The elastic moduli (cubic elasticity  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  and  $C_{44}$ ) take here typical values for 300 series austenitic stainless steels at 340°C. However, as it is well-known in porous plasticity, the results of the limit analysis do not depend on the elastic properties of the material but only on the plasticity threshold value. This has been checked for unit cell computations with a single void but also for populations of interacting voids, for instance in Fritzen et al. (2012). The same feature has been checked here for crystal plasticity in the presented unit cell computations. The value of the parameter  $\dot{\gamma}_0$  is chosen to satisfy the condition given in Eq. 14. The same threshold value  $\tau_0 = 60$  MPa is considered for all slip systems in Schmid's law. Accordingly, activation of one slip system at a given Gauss point of the finite element mesh depends on the value of the resolved shear stress at this point. The 12 possible slip systems are considered at each material point. In the simulation, slip system activation is heterogeneous due to the presence of the hole. Multiple slip is allowed and takes place at several locations. Fully-implicit time integration method is used for the material's constitutive equations (Foerch et al., 1997).

$C_{11}$	$C_{12}$	$C_{44}$	$\tau_0$	$n$	$\dot{\gamma}_0$
199 GPa	136 GPa	105 GPa	60 MPa	5	$7.776 \cdot 10^8 \text{ s}^{-1}$

Table 2: Material parameters for FE simulations

### 3.1. 3D finite element unit cell model

In the last decades, the FE simulation of unit cells has become a well-known simulation technique to investigate the global and local responses of heterogeneous materials (Needleman (1972), Tvergaard (1981), Tvergaard (1982), Koplik and Needleman (1988), Worswick and Pick (1990),

Quinn et al. (1997), Pardoen and Hutchinson (2000) and Benzerga and Besson (2001)). Three-dimensional unit cell calculations of porous media, considered as an homogenization method of a representative volume element (RVE) containing uniformly distributed voids, are widely applied to study the effect of various parameters such as multiaxial stress state, crystallographic orientation, and initial void volume fraction, on void growth (Liu et al. (2007), Yerra et al. (2010), Ha and Kim (2010) and Yu et al. (2010)) and coalescence (Kuna and Sun (1996), Zhang et al. (1999), Schacht et al. (2003), Liu et al. (2007), Liu et al. (2010), Yerra et al. (2010) and Liu et al. (2012)).

In this study, FE simulation of unit cells is used to determine the yield surface of porous single crystals depending on crystallographic orientation and void volume fraction. Results of the simulation are used to calibrate the model parameters ( $q_1$ ,  $q_2$  and  $\alpha$ ) introduced in the previous section Eq. 8. The FE mesh used for the simulation is shown in Fig. 1. The cubic cell (length  $l_0$ ) contains a spherical void (radius  $r_0$ ) located at the center of the cell. Except for specific crystallographic orientation the problem has no symmetry so that the full cell has to be meshed. The void volume fraction is simply given by:  $f = V_{void}/V_{tot} = \frac{4}{3}\pi r_0^3/l_0^3$ .

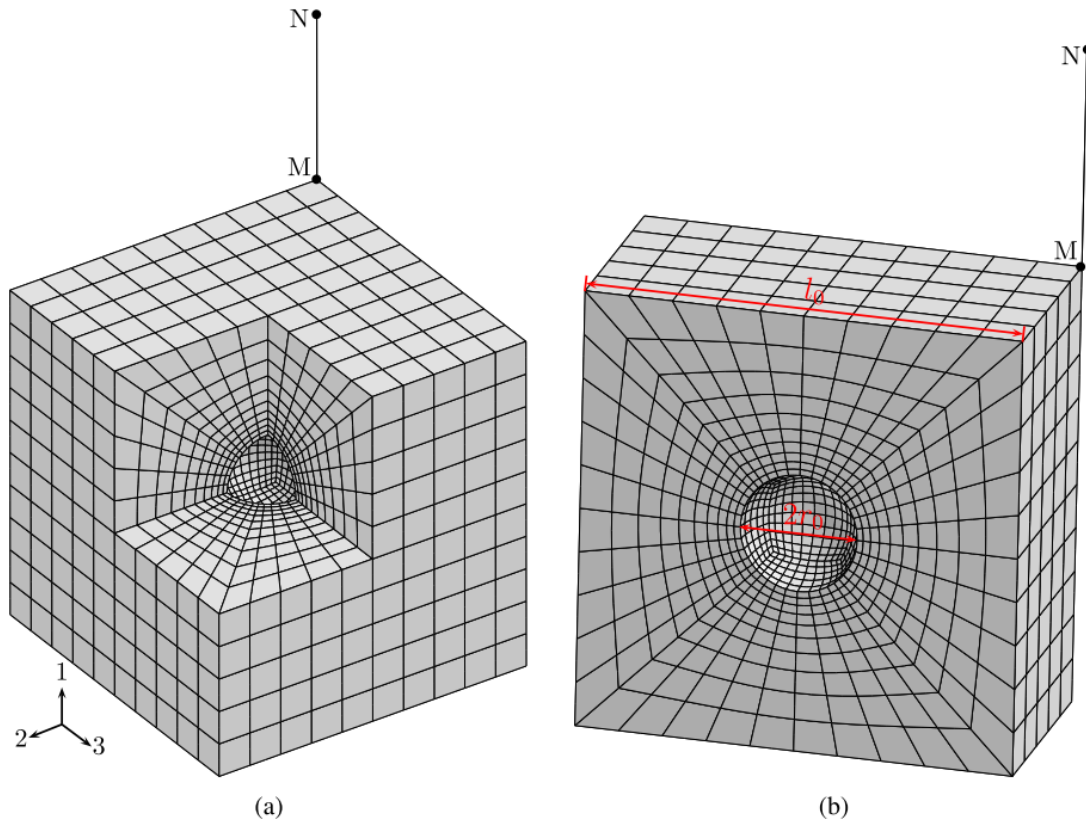


Figure 1: Unit cell with a spherical void in its center. (a) FE mesh for  $f = 0.01$ , with a cut of  $1/8$  of the full geometry; (b) half of the full geometry showing the dimensions of the unit cell with a central void.

The 3D mesh is made of reduced-integrated quadratic hexahedral elements (see Fig. 1). The simulations were carried out using the Zset FE software (Besson and Foerch, 1998). A convergence study was also performed to optimize calculation time while keeping sufficient accuracy. Calculations are carried out so as to prescribe a constant overall stress triaxiality ratio (ratio of the mean stress to the von Mises stress). The overall macroscopic stress tensor is expressed in terms of 3 principal stresses as:

$$\underline{\sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_2 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_3 \end{bmatrix} = \sigma_1 \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \eta_2 & 0 \\ 0 & 0 & \eta_3 \end{bmatrix} \quad (15)$$

where  $\eta_2$  and  $\eta_3$  are loading parameters which are kept constant for every single unit cell simulation. Both parameters vary between  $-0.5$  and  $1$ . It is assumed that  $\sigma_1 > 0$ . The stress triaxiality ratio is expressed as:

$$a = \frac{\sigma_m}{\sigma_{eq}} = \frac{1 + \eta_2 + \eta_3}{3\sqrt{1 - \eta_2 - \eta_3 - \eta_2\eta_3 + \eta_2^2 + \eta_3^2}} \quad (16)$$

As triaxiality shall be kept constant during the loading history, the parameters  $\eta_2$  and  $\eta_3$  have to remain constant whereas the ratios of mean strains  $E_{22}/E_{11}$  and  $E_{33}/E_{11}$  will vary in time. Two strategies were used to prescribe constant triaxiality. The first one uses the technique presented by Brocks et al. (1995). A special truss element (MN in Fig. 1) is added to the mesh. It acts as a spring in the main loading direction (i.e. **1**) which measures the mean stress component in that direction. A portion ( $\eta_2$  and  $\eta_3$ ) of this stress is then applied in both other directions **2** and **3**. Normal displacements on the cell faces are kept homogeneous so that the cell keeps a parallelipedic shape. This technique allows to perform displacement controlled FE simulations. It is suitable for highly symmetric crystal directions (e.g. **1** = [100], **2** = [010], **3** = [001]) but tends to over-constrain the model for general orientations so that high stresses are generated (in some cases stresses higher than the theoretical stresses for the undamaged single crystal are obtained). For this reason a second simulation technique assuming periodic boundary conditions was also used. The displacement vector  $\vec{u}$  associated with each material point  $\vec{x}$  takes the form :

$$\vec{u} = \underline{E} \cdot \vec{x} + \vec{v}, \quad \forall \vec{x} \in V_{tot} \quad (17)$$

where  $\underline{E}$  denotes the macroscopic strain tensor and  $\vec{v}$  is the periodic fluctuation vector, which takes the same value for two points situated on opposite outer boundary surfaces  $\partial V_{tot}$  of the entire volume  $V_{tot}$ , while the traction vector  $\vec{t} = \underline{\sigma} \cdot \vec{n}$  takes opposite values on these two points, with  $\vec{n}$  being the outer unit normal vector on  $\partial V_{tot}$ . In the finite element implementation, the components of the macroscopic strain tensor,  $E_{ij}$ , are degrees of freedom and the associated reactions of which,  $R_{ij}$ , correspond to the macroscopic stress component  $\Sigma_{ij}$  times the cell volume:  $R_{ij} = V_{tot} \times \Sigma_{ij}$ , see (Besson et al., 2009). Simulations are then carried out prescribing the different reactions so

that  $R_{22} = \eta_2 R_{11}$ ,  $R_{33} = \eta_3 R_{11}$  and  $R_{12} = R_{23} = R_{31} = 0$ . In that case, simulations are load controlled.

Both methods (spring loaded cell and fully periodic cell) were compared in the case of highly symmetric triaxial loading (e.g.  $[100]$ – $[010]$ – $[001]$ ). Results shown in Fig. 2 indicate that both methods result in almost identical results in this particular case. In the general case of non-symmetric orientations, spring loading conditions lead to an over-constraining effect so that slightly larger yield surfaces are generated. It is also shown that the stress levels quickly stabilize (due to the absence of work hardening). Based on these results, stress levels used to calibrate and validate the proposed yield function will be determined for a strain along direction **1** equal to 3%.

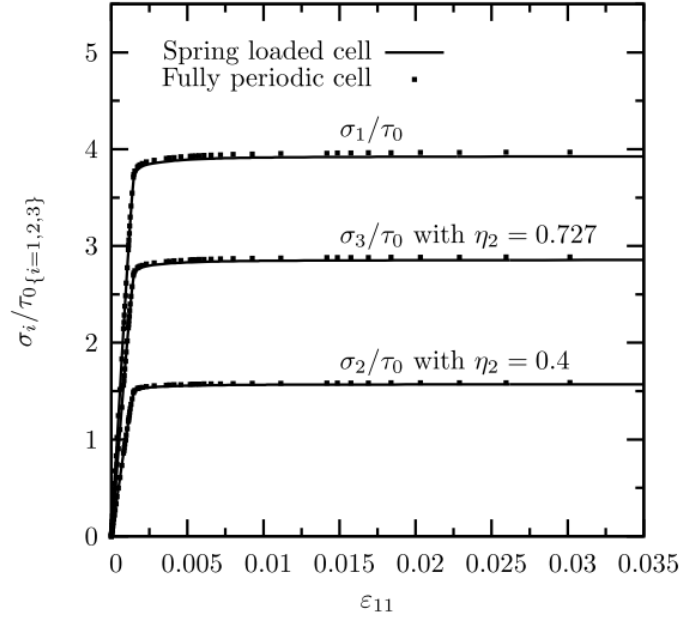


Figure 2: Normalized macroscopic stresses along the three principal loading directions as functions of the macroscopic deformation along direction **1** for **1** =  $[100]$ , **2** =  $[010]$  and **3** =  $[001]$  with  $\eta_2 = 0.4$ ,  $\eta_3 = 0.727$  and a porosity level  $f = 0.01$ .

### 3.2. Model parameter determination

In order to identify the model parameters from various numerical simulations for different crystallographic orientations, the proposed model can be written as:

$$\left( \frac{((\underline{P}^T \cdot \underline{\sigma} \cdot \underline{P}) : \underline{m}_s)^2}{\tau_s^{*2}} + \alpha \frac{2f \sigma_{eq}^2}{45 \tau_s^{*2}} \right) + 2q_1 f \cosh \left( q_2 \sqrt{\frac{3}{20}} \frac{\sigma_m}{\tau_s^*} \right) - 1 - (q_1 f)^2 \stackrel{\text{def. } \tau_s^*}{=} 0 \quad (18)$$

where  $\underline{\sigma}$  is the macroscopic stress tensor on global coordinates defined in Eq. 15 and  $\underline{P}$  denotes the rotation matrix following  $\mathbf{zxz}$  convention (Goldstein et al. (2002)), which turns global basis to crystal basis using Euler angles  $(\phi_1, \Phi, \phi_2)$ , given by:



$$\underline{P} = \begin{bmatrix} \cos \phi_1 \cos \phi_2 - \sin \phi_1 \cos \Phi \sin \phi_2 & \sin \phi_1 \cos \phi_2 + \cos \phi_1 \cos \Phi \sin \phi_2 & \sin \Phi \sin \phi_2 \\ -\cos \phi_1 \sin \phi_2 - \sin \phi_1 \cos \Phi \cos \phi_2 & -\sin \phi_1 \sin \phi_2 + \cos \phi_1 \cos \Phi \cos \phi_2 & \sin \Phi \cos \phi_2 \\ \sin \phi_1 \sin \Phi & -\cos \phi_1 \sin \Phi & \cos \Phi \end{bmatrix} \quad (19)$$

To validate the proposed model for single crystals, five crystallographic orientations for the main loading direction (direction **1**) have been chosen: [100], [110], [111], [210] and  $[\bar{1}25]$ . Another three cases are complemented to study the effect of secondary loading directions (directions **2** and **3**). All these cases are summarized in Tab. 3. Five porosity levels are considered as follows :  $f=0.005, 0.01, 0.02, 0.05$  and  $0.1$ .

Test number	Crystallographic orientation on global coordinates 1-2-3	Euler angles (°)		
		$\phi_1$	$\Phi$	$\phi_2$
1	[100]-[010]-[001]	0	0	0
2	[100]-[01 $\bar{1}$ ]-[011]	180	45	180
3	[100]-[02 $\bar{1}$ ]-[012]	180	26.57	180
4	[110]-[ $\bar{1}$ 10]-[001]	45	0	0
5	[111]-[ $\bar{2}$ 11]-[0 $\bar{1}$ 1]	0	45	54.74
6	[210]-[ $\bar{1}$ 20]-[001]	26.57	0	0
7	[ $\bar{1}$ 25]-[ $\bar{1}$ 2 $\bar{1}$ ]-[210]	116.57	90	65.91
8	[ $\bar{1}$ 25]-[0 $\bar{5}$ 2]-[(29)25]	93.95	80.24	67.86

Table 3: Crystallographic orientations for numerical simulations and corresponding Euler angles.

Note that a special case with axisymmetric triaxial stress state ( $\eta_2 = \eta_3 = \eta$ ) will also be investigated. In that case the stress triaxiality ratio is expressed as:  $a = \frac{1}{3}(1 + 2\eta)/(1 - \eta)$ . The orthogonality of the three imposed principal stresses, the axisymmetric stress state and the symmetric crystalline structure of FCC materials allow deriving a simplified expression of the resolved shear stress on slip system  $s$ , which is then expressed as:

$$|\tau_s| = |(\underline{P}^T \cdot \underline{\sigma} \cdot \underline{P}) : \underline{m}_s| = F_s^1 \sigma_{eq} = F_s^1 (1 - \eta) \sigma_1 \quad (20)$$

where  $F_s^1$  is the Schmid factor for slip system  $s$  obtained from a uniaxial tensile test on the matrix material along the main loading direction **1**. Hence, the resulting effective resolved stress  $\tau_s^*$  for slip system  $s$  is given by:

$$\left( (F_s^1)^2 + \alpha \frac{2f}{45} \right) \frac{(1 - \eta)^2 \sigma_1^2}{\tau_s^{*2}} + 2q_1 f \cosh \left( \frac{q_2}{2} \sqrt{\frac{1}{15}} \frac{(1 + 2\eta) \sigma_1}{\tau_s^*} \right) - 1 - (q_1 f)^2 \stackrel{\text{def.}}{=} \tau_s^* \quad (21)$$

Based on this equation, the whole range of positive stress triaxiality from zero to infinity will be investigated. In FE simulations, ten distributed values of triaxialities have been chosen to test the proposed model (see Tab. 4).

$a$	0	0.33	0.5	1.0	1.5	3.0	5.0	10.0	50.0	$+\infty$
$\eta$	-0.5	0	0.143	0.4	0.538	0.727	0.824	0.906	0.980	1.0

 Table 4: Triaxialities applied for FE simulations and values of corresponding model parameter  $\eta$ .

A total number of 456 FE calculations were carried out and listed in Tab. 5, with above-mentioned triaxial stress states, crystallographic orientations and porosities. The loading conditions are characterized by  $\eta_2$  and  $\eta_3$ . Four cases were considered successively:  $\eta_2 = \eta_3$ ,  $\eta_2 = 0.4$ ,  $\eta_2 = 0.727$ ,  $\eta_2 = 1$ . In each case, 10 values of  $\eta_3$  were applied. The porosity  $f = 0.01$  was first considered for 8 crystallographic orientations. Four more porosities  $f = 0.005, 0.02, 0.05$  and  $0.1$  were considered, with 3 crystallographic orientations  $[001]$ ,  $[111]$  and  $[-125]$ , and again 10 loading conditions. Additional tests are necessary to check the effect of porosity along other crystallographic orientations  $[011]$  and  $[210]$ , for porosities  $f = 0.005$  and  $0.02$ .

The details of these simulations results will be presented and discussed in the next section. The model parameters  $\alpha$ ,  $q_2$  and  $q_1$  have been identified by minimizing (Levenberg-Marquardt method) the quadratic difference between model results and FE unit cell simulation results. Optimized values are given in Tab. 6. Comparison of these two sets of data after identification is shown in Fig. 3. The maximum error is always less than 10% and much smaller in many cases. Theoretical values for  $\alpha$ ,  $q_1$  and  $q_2$  are equal to 1 (see Eq. 6). The calibrated value for  $q_1$  is close to 1.5 which is in agreement with the literature in the case of an isotropic von Mises matrix (see e.g. (Faleskog et al., 1998, Gao et al., 1998)). In particular a value for  $q_1$  equal to 1.5 is very often used. The calibrated value for  $\alpha$  is significantly higher than the theoretical one. Note that  $\alpha$  plays an important role at high porosities (i.e. 5% and 10%).

Test details	Number of tests	Figures
8 orientations $f = 0.01 \times (4 \times 10$ FE calculations – 3 redundant tests)	$8 \times (4 \times 10 - 3) = 296$	4-14
4 porosities $\times$ 3 orientations $\times$ 10 FE calculations	$4 \times 3 \times 10 = 120$	16
$f = 0.005, f = 0.02, \times$ 2 orientations $[110]$ and $[210] \times$ 10 FE calculations	$2 \times 2 \times 10 = 40$	none <sup>1</sup>

<sup>1</sup> used only for parameter identification

Table 5: List of all the performed unit cell FE calculations.

$\alpha$	$q_1$	$q_2$
6.456	1.471	1.325

Table 6: Adjusted values of model parameters.

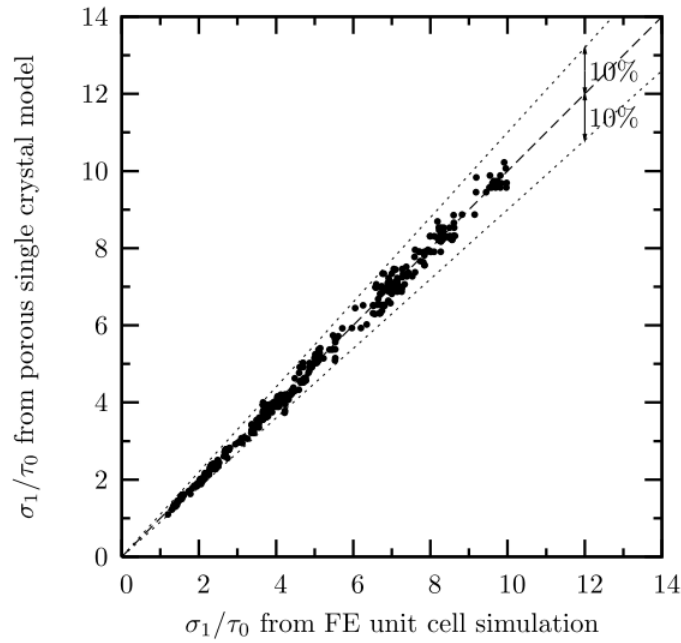


Figure 3: Identification results showing comparison points between FE unit cell simulations and effective single crystal model predictions. They are contained in a 10% error cone.

#### 4. Results and discussions

In this section, the model predictions and unit cell analyses are compared for specific cases in order to examine the effect of crystallographic orientation and porosity on the resulting yield surface. Note that, for the sake of a nearly perfectly plastic behaviour used in FE simulations, the limit surfaces obtained from limit analyses could be considered as a good estimation of the yield surfaces. Therefore, it was assumed that the limit surface is identical to the yield surface so that in this section the "yield surface" term would be used to describe these two material properties.

##### 4.1. Representation of the yield surface

The overall yield surface results, as in the case of a non porous single crystal, from the intersections of the yield surfaces (12 in the present case) for each individual slip system. It is therefore not possible to represent the macroscopic yield surface by expressing the von Mises stress as a function of the mean stress (i.e.  $\sigma_{eq} = g(\sigma_m)$ ) as in the case of the Gurson model. In the following, the yield surface will be represented by plotting (3D plot) the macroscopic stress along the main loading direction  $\mathbf{1}$  normalized by the CRSS, as a function of secondary loading parameters  $\eta_2$  and  $\eta_3$ :

$$\sigma_1/\tau_0 = g(\eta_2, \eta_3) \quad (22)$$

In the case of axisymmetric loading (i.e.  $\eta_2 = \eta_3 = \eta$ ), this normalized macroscopic stress is simply expressed as a function of  $\eta$  (2D plot) as:

$$\sigma_1/\tau_0 = g(\eta) \quad (23)$$

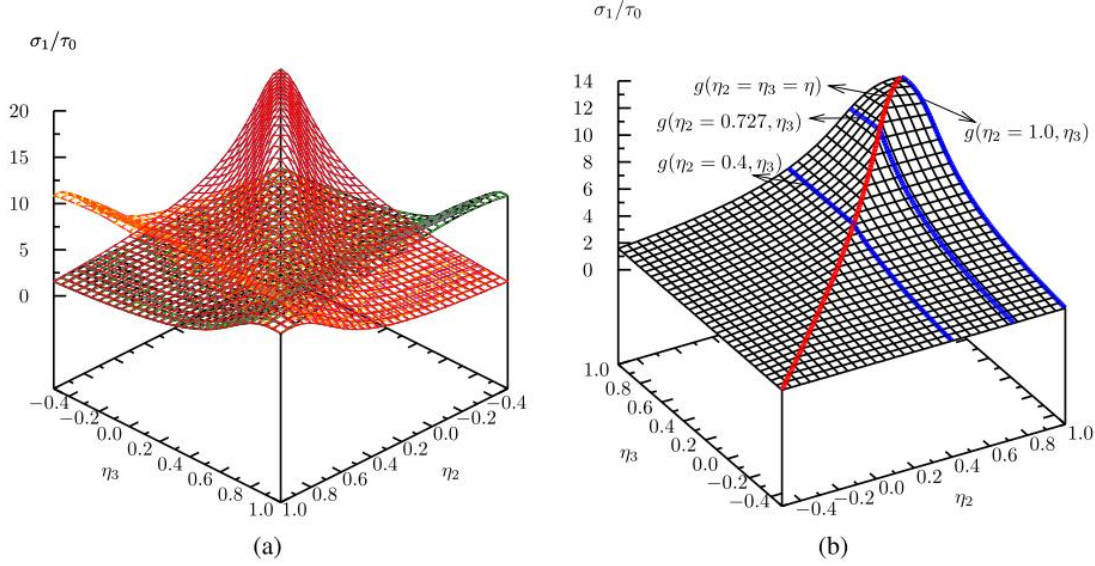


Figure 4: 3D yield surfaces for  $[100] - [010] - [001]$  triaxial loading direction, with  $f = 0.01$ . (a) Yield surfaces for each of the 12 slip systems; (b) Yield surface for the porous single crystal.

#### 4.2. Results for $[100]-[010]-[001]$ triaxial loading

In this section, the three triaxial loading directions (**1**, **2** and **3**) coincide with the  $\langle 100 \rangle$  directions of the single crystal. The porosity is equal to 1%. The resulting theoretical 12 yield surfaces (Eq. 8) for all slip systems are plotted in Fig. 4a while Fig. 4b shows the overall yield surface resulting from the intersection of the individual yield surfaces. In that particular loading case, it is important to recall that the  $\langle 100 \rangle$  loading direction family leads to the same projection of the stress vector on the four slip planes of a FCC crystal (see Tab. 1). For this symmetry reason, only three distinct groups of curves are obtained, which correspond to the three slip systems on each slip plane (see Fig. 4a). In particular, the yield surface of the single crystal is symmetric with respect to the  $\eta_2 = \eta_3$  line. Four special loading cases to be closely investigated in the following are indicated by colored lines (red and blue lines) in Fig. 4b: (i)  $\eta_2 = \eta_3 = \eta$ , (ii)  $\eta_2 = 0.4$ , (iii)  $\eta_2 = 0.727$  and (iv)  $\eta_2 = 1$ . Model results Eq. (8) are now compared to unit cell simulation results.

Results for the  $\eta_2 = \eta_3$  case are compared in Fig. 5a. In that particular case, the resulting yield surface is differentiable. This corresponds to the fact that the same slip systems are activated for all loading conditions. For this highly symmetric case, two of the three slip systems of each slip plane

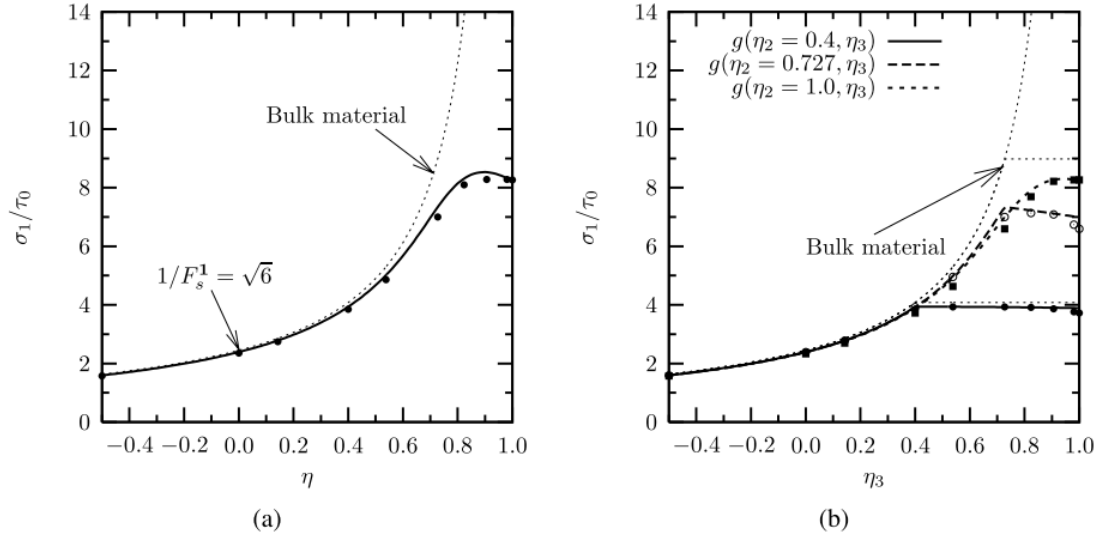


Figure 5: Yield surfaces for  $[100] - [010] - [001]$  triaxial loading direction, with  $f = 0.01$ . (a) Yield surface for the porous single crystal, with  $\eta_2 = \eta_3 = \eta$  (i.e. red curve in Fig. 4b). (b) Yield surfaces for the porous single crystal, with  $\eta_2$  respectively fixed to 0.4, 0.727 and 1.0 (i.e. blue curves in Fig. 4b). Thick continuous and dashed lines correspond to the yield surfaces for the proposed model. Symbols correspond to 3D unit cell FE analyses. Thin dashed lines correspond to the bulk material (non porous single crystal) obtained from the proposed model for each studied case.

play the same role and are consequently active (in total eight slip systems are active). For the same reason, similar results are also obtained for the  $\eta_2 = 1$  case (i.e.  $\sigma_1 = \sigma_2$ ) in Fig. 5b, but the active slip systems are different from that of the previous case. However, in cases with  $\eta_2$  fixed to 0.4 or 0.727 (Fig. 5b), two regimes are observed on the yield surface. In the case where  $\eta_2 = 0.4$  (resp.  $\eta_2 = 0.727$ ), only one slip system is active on each slip plane for  $\eta_3$  between  $-0.5$  and  $0.4$  (resp.  $0.727$ ). For  $\eta_3$  above  $0.4$  (resp.  $0.727$ ), the active slip systems are replaced by different ones so that the resulting yield surface presents a discontinuous derivative at  $\eta_3 = 0.4$  (resp.  $\eta_2 = 0.727$ ). These evolutions are due to the behaviour of the matrix material only ; one can note that similar trends are observed for the non-porous single crystal (called bulk material in the figures, see the thin dashed lines in Fig. 5).

In all these cases, the proposed model accurately captures the FE simulations over the whole range of investigated stress triaxialities. Note that due to the low porosity level (1%), results obtained for the porous crystal and the bulk material remain close except for high stress triaxialities. In particular  $\sigma_1 \rightarrow \infty$  when  $\eta_2 \rightarrow 1$  and  $\eta_3 \rightarrow 1$  for the bulk material whereas  $\sigma_1$  keeps finite values for the porous single crystal. On the other hand for pure tensile loading ( $\eta_2 = \eta_3 = 0$ ), both model and simulation are close to the theoretical value for the bulk single crystal:  $\sigma_1/\tau_0 \approx 1/F_s^1 = \sqrt{6}$

where  $F_s^1$  is the Schmid factor for  $[100]$  loading.

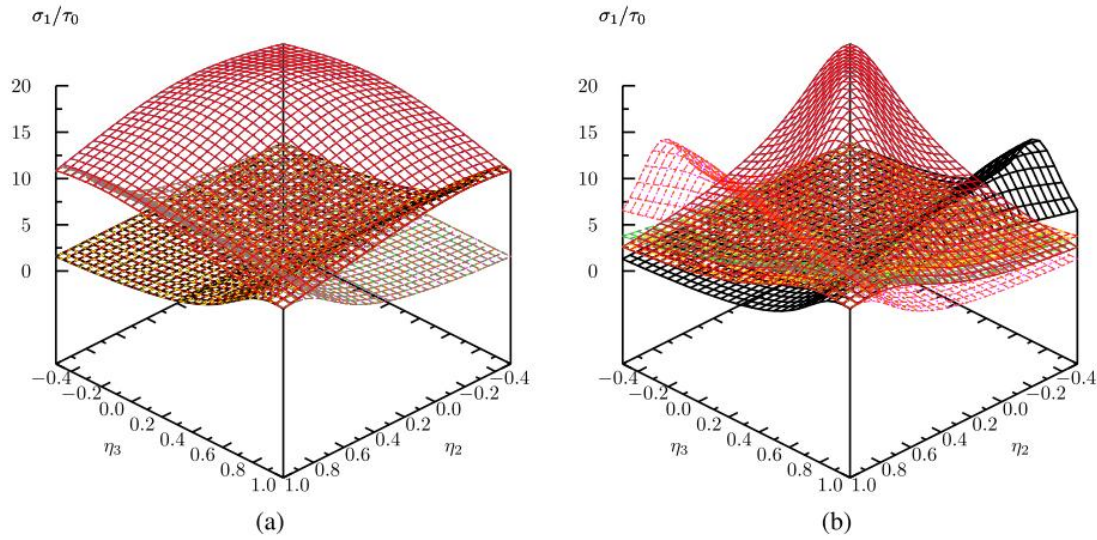


Figure 6: 3D yield surfaces for each of the 12 slip systems, with  $f = 0.01$ : (a) for  $[100] - [01\bar{1}] - [011]$  triaxial loading direction; (b) for  $[100] - [02\bar{1}] - [012]$  triaxial loading direction.

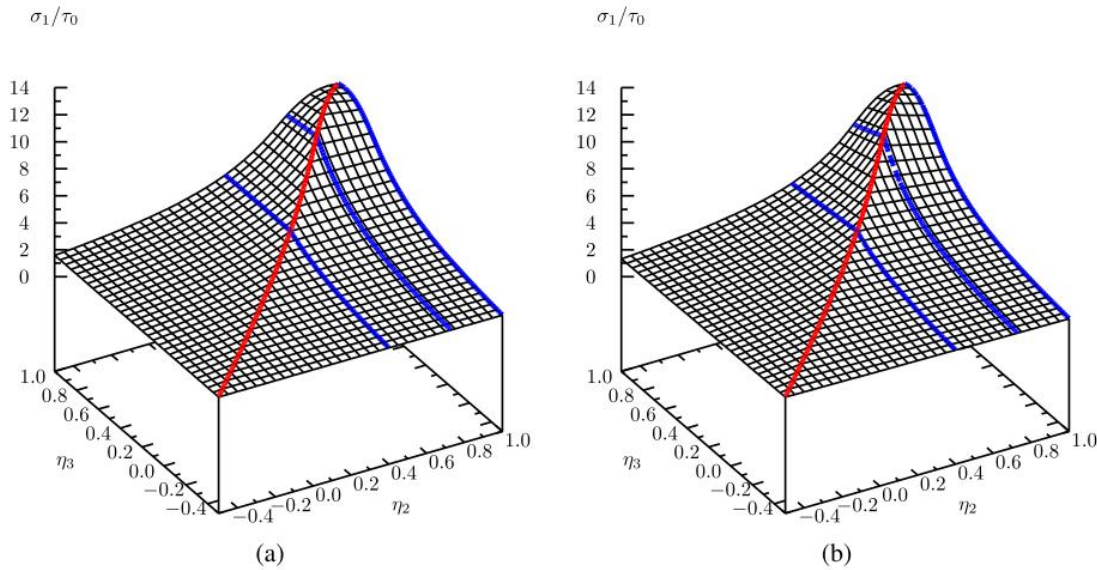


Figure 7: Yield surfaces for the porous single crystal, with  $f = 0.01$ : (a) for  $[100] - [01\bar{1}] - [011]$  triaxial loading direction; (b) for  $[100] - [02\bar{1}] - [012]$  triaxial loading direction.

#### 4.3. Effect of secondary loading direction: $[100] - [0ij] - [0\bar{j}i]$

The effect of the secondary loading direction on the yield surface of the porous single crystal is investigated for a fixed main loading direction  $\mathbf{1} = [100]$ . The secondary loading direction  $\mathbf{3}$  is

set to  $[011]$  or to  $[012]$ . The yield surfaces for each effective slip system of the porous single crystal are illustrated respectively in Fig. 6a and Fig. 6b for these two cases. In the first case ( $[100] - [01\bar{1}] - [011]$ ), just like in the reference case ( $[100]-[010]-[001]$ ), the loading direction family  $\langle 011 \rangle$  leads to the same Schmid factor for every activated slip system while for the other non-activated slip systems the Schmid factor is equal to zero. Moreover, the Schmid factors for  $\langle 100 \rangle$  and  $\langle 110 \rangle$  loading direction families have the same value ( $F_s = \sqrt{6}/6$ ). For these reasons, only 3 groups of yield surfaces can be identified, and the yield surface of the overall porous single crystal (see Fig. 7a) presents exactly the same surface as in the reference case. However non-activated slip systems lead to different yield surfaces (compare Figs. 4a and 6a) so that the post-yield behaviour could be different in the case where the single crystal exhibits work-hardening.

In the second case ( $[100] - [02\bar{1}] - [012]$ ), since the secondary loading direction does not lead to the same Schmid factor for every slip system, more numerous distinct yield surfaces are observed in Fig. 6b, and the yield surface for the porous single crystal in this case (Fig. 7b) is slightly different from the previous one.

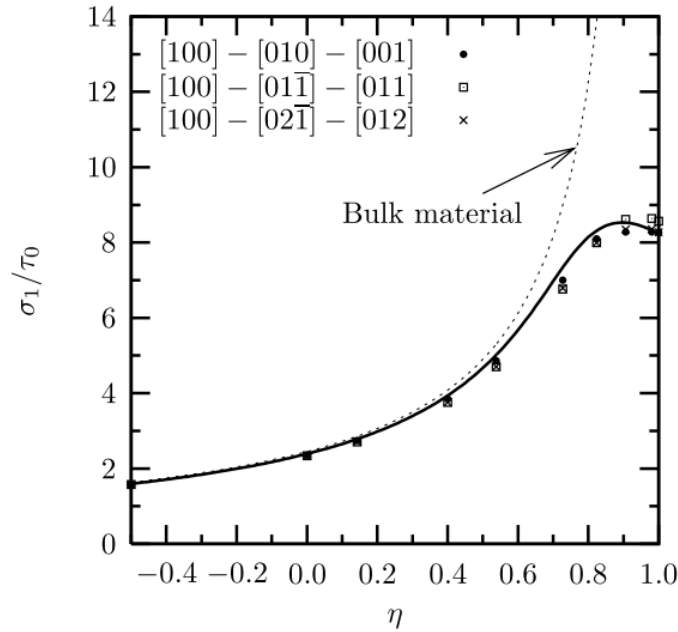


Figure 8: Yield surfaces for  $[100]$  main loading direction, in the case with  $\eta_2 = \eta_3 = \eta$ , for various secondary loading directions,  $f = 0.01$ .

Fig. 8 shows the yield surface predicted by the proposed model with corresponding data points calculated by FE method for  $\eta_2 = \eta_3 = \eta$ , for the same main loading direction  $[100]$  and different secondary loading directions. As shown from Eq. 21, the secondary loading directions do not affect the predicted yield surface in this particular diagonal case. In the case explored by Figs. 9a and 9b, with fixed values for  $\eta_2$ , the yield surfaces are slightly different while the proposed model is able to

capture the FE simulation data with a good accuracy.

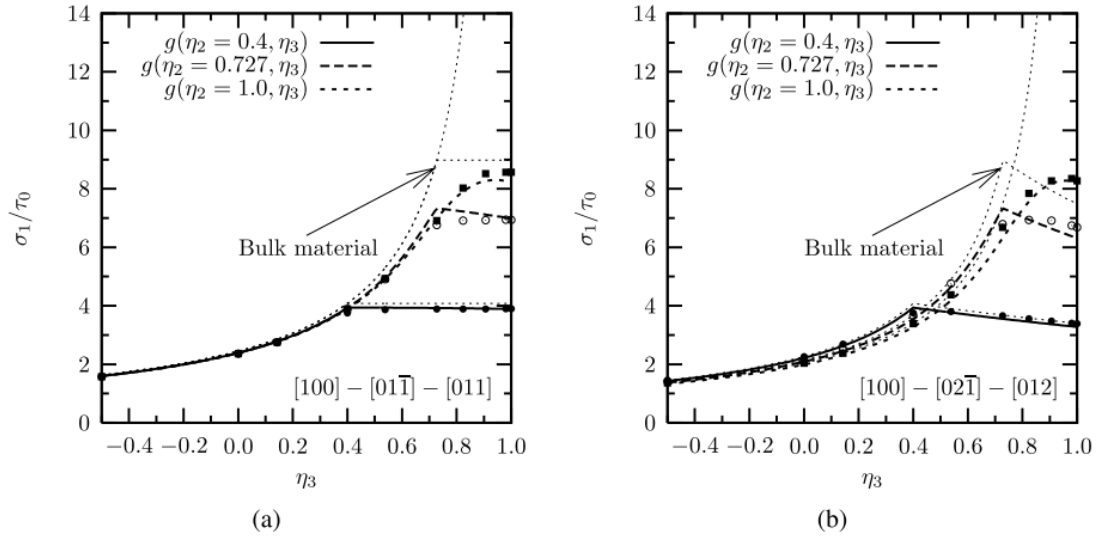


Figure 9: Yield surfaces for the porous single crystal, in the cases of  $\eta_2$  fixed at 0.4, 0.727 and 1.0, with  $f = 0.01$ : (a) for  $[100] - [01\bar{1}] - [011]$  triaxial loading direction; (b) for  $[100] - [02\bar{1}] - [012]$  triaxial loading direction.

#### 4.4. Effect of main loading direction

The effect of the main loading direction (**1**) is investigated in this section. Comparisons between results obtained by the proposed model and by FE unit cell simulations are shown for the following orientations  $[110]$  (see Fig. 10),  $[111]$  (see Fig. 11),  $[210]$  (see Fig. 12) and finally  $[\bar{1}25]$  (see Fig. 13). In this last case, the effect of the secondary loading direction (**3**) is also studied.

Yield surfaces predicted by the model for main loading directions taken equal to  $[110]$ ,  $[111]$  or  $[210]$  significantly differ (see Figs. 10b, 11b and 12b). In comparison to the  $\mathbf{1} = [100]$  case, yield surfaces are no longer symmetric with respect to the  $\eta_2 = \eta_3$  line. As previously noted, the sharp slope changes on the yield surfaces correspond to a change in the active slip systems. These trends are directly due to the crystallographic nature of the matrix material. Due to the low porosity, the difference between the yield surface of the bulk material (see Figs. 10c/10d, 11c/11d and 12c/12d) and that of the porous material is only significant at high stress triaxiality levels. In all cases, the model prediction and the FE unit cell results are in very good agreement (see Figs. 10c/10d, 11c/11d and 12c/12d, model: lines, FE results: symbols)

All cases presented above exhibit some degree of symmetry so that several individual slip systems may have the same yield surface. In order to check the validity of the proposed model in cases where loading has little or no symmetry with respect to the crystallographic orientation, main loading



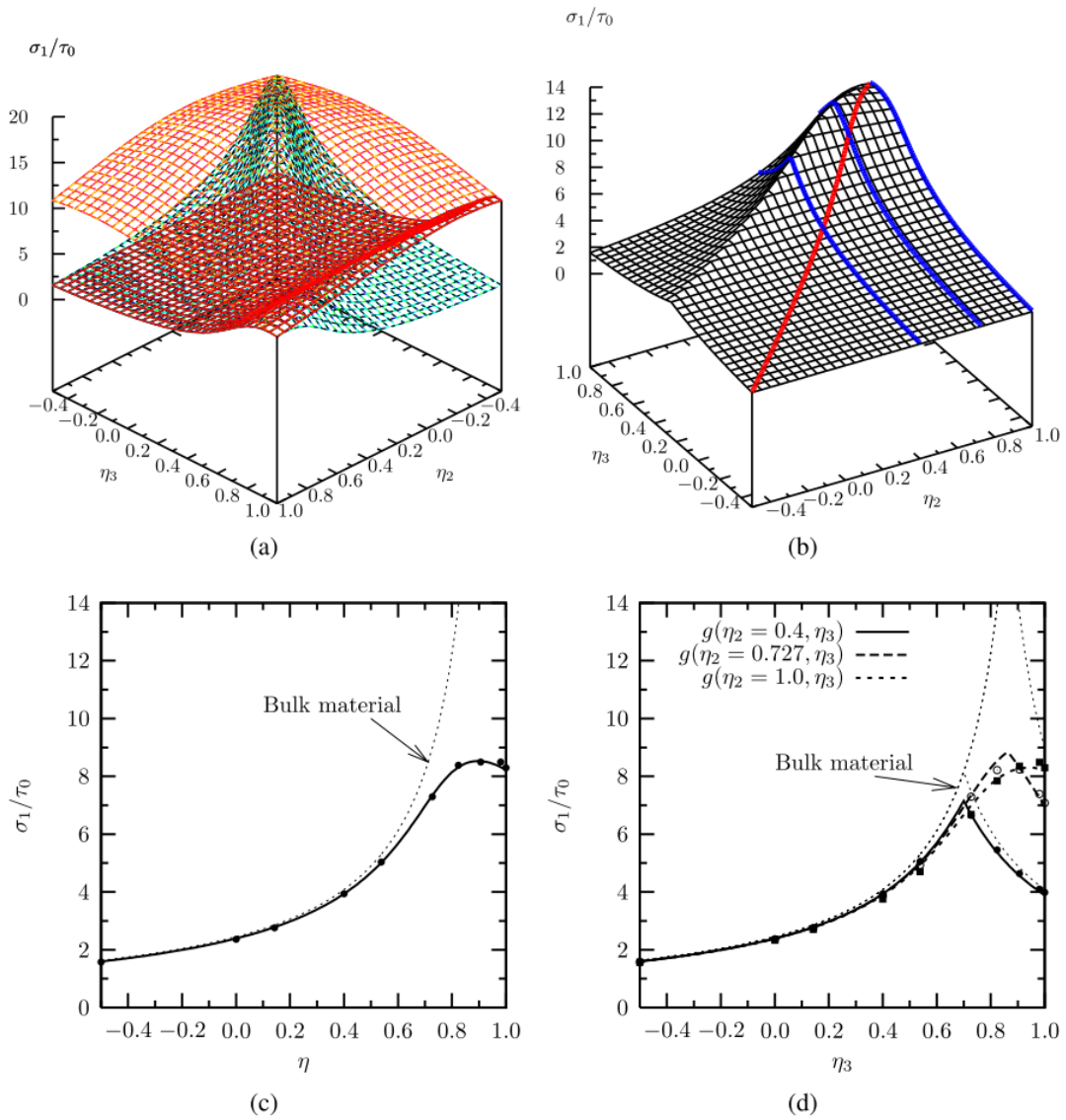


Figure 10: Yield surfaces for  $[110] - [\bar{1}10] - [001]$  triaxial loading direction, with  $f = 0.01$ . (a) 3D yield surfaces for all 12 slip systems; (b) 3D yield surface for the porous single crystal. (c) Yield surface for the porous single crystal, with  $\eta_2 = \eta_3 = \eta$ ; (d) Yield surfaces for the porous single crystal, with  $\eta_2$  fixed at 0.4, 0.727 and 1.0.

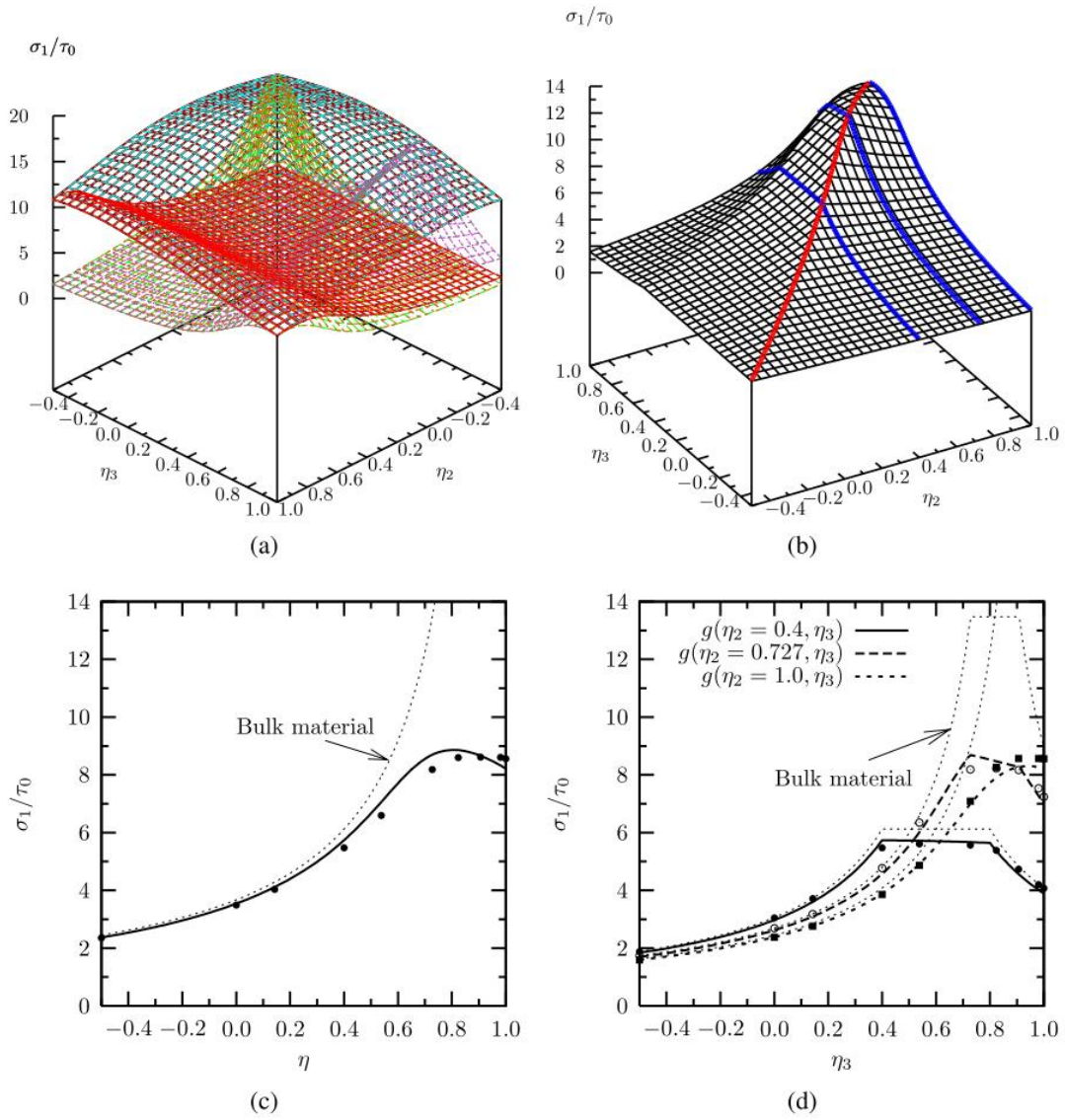


Figure 11: Yield surfaces for  $[111] - [\bar{2}11] - [0\bar{1}1]$  triaxial loading direction, with  $f = 0.01$ . (a) 3D yield surfaces for all 12 slip systems; (b) 3D yield surface for the porous single crystal. (c) Yield surface for the porous single crystal, with  $\eta_2 = \eta_3 = \eta$ ; (d) Yield surface for the porous single crystal, with  $\eta_2$  fixed at 0.4, 0.727 and 1.0.

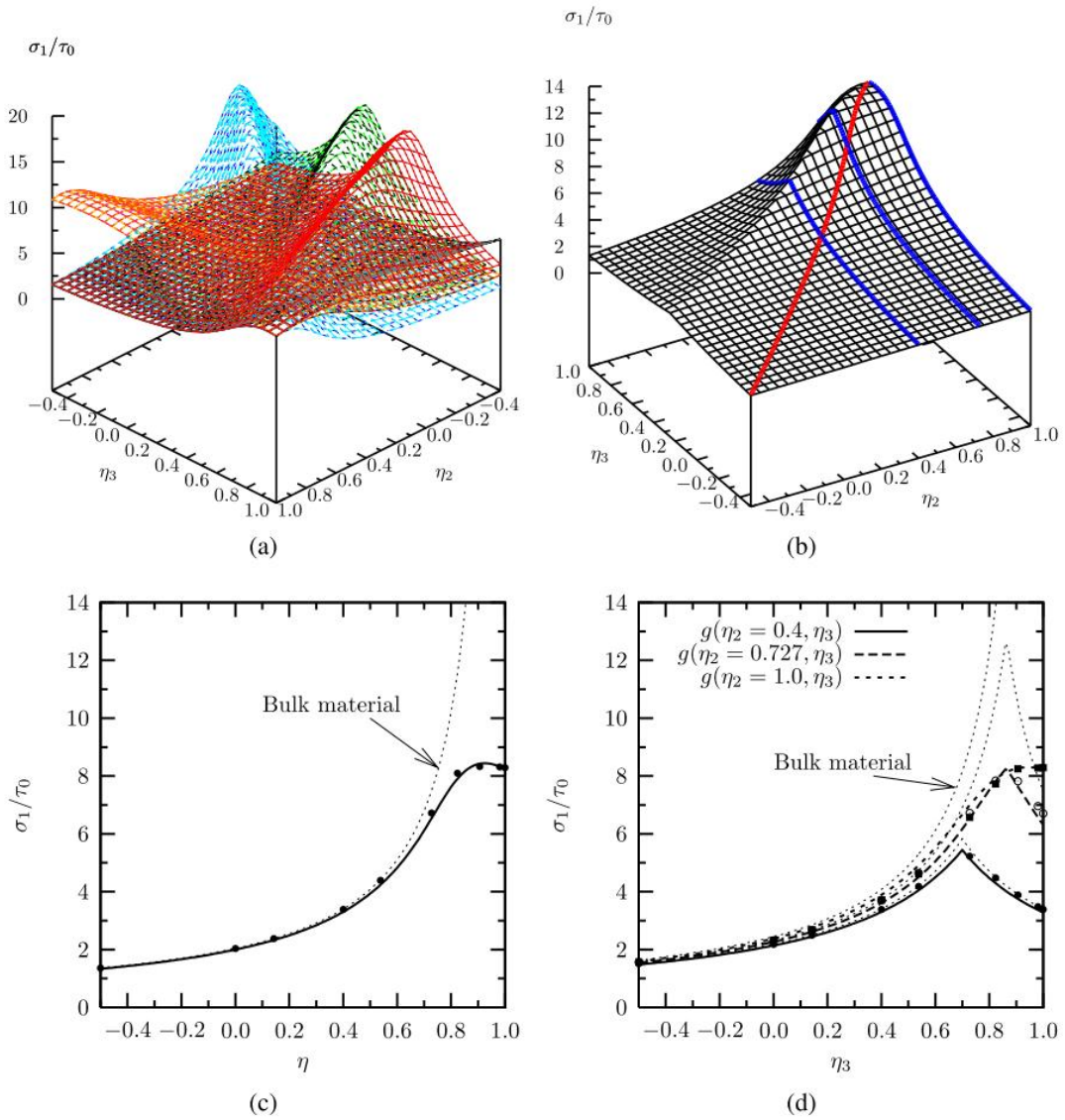


Figure 12: Yield surfaces for  $[210] - [\bar{1}20] - [001]$  triaxial loading direction, with  $f = 0.01$ . (a) 3D yield surfaces for all 12 slip systems; (b) 3D yield surface for the porous single crystal. (c) Yield surface for the porous single crystal, with  $\eta_2 = \eta_3 = \eta$ ; (d) Yield surface for the porous single crystal, with  $\eta_2$  fixed at 0.4, 0.727 and 1.0.

along the  $[\bar{1}25]$  crystal direction was investigated. For  $\mathbf{3} = [210]$ , 11 different yield surfaces for the slip systems are obtained whereas for  $\mathbf{3} = [(29)25]$  all 12 yield surfaces differ. The resulting theoretical yield surfaces are plotted in Figs. 13 for both secondary loading directions. Comparisons with FE results are shown in Fig. 14a for the  $\eta_2 = \eta_3$  case, in Fig. 14b for various fixed values for  $\eta_2$  and  $\mathbf{3} = [210]$  and Fig. 14c for various fixed values for  $\eta_2$  and  $\mathbf{3} = [(29)25]$ . The agreement between the model and the simulation results is excellent. Note, in particular, that the differences between  $\mathbf{3} = [210]$  and  $\mathbf{3} = [(29)25]$  at high stress triaxialities are well reproduced by the model (Fig. 14b and Fig. 14c).

Yield surfaces in the particular case where  $\eta_2 = \eta_3$  are compared in Fig. 15 for five different main loading directions. In that particular case results for  $\mathbf{1} = [100]$  and  $\mathbf{1} = [110]$  coincide as well as those for  $\mathbf{1} = [210]$  and  $\mathbf{1} = [\bar{1}25]$  as they share the same maximum Schmid factor. At low and moderate stress triaxialities the differences between the yield surfaces is controlled by the value of the Schmid factor for the bulk material. These differences tend to decrease at very high triaxiality levels. Under purely hydrostatic loads ( $\eta \rightarrow 1$ ) the model predicts a unique yield stress  $\sigma_1$  which is given by (solving Eq. 8 and Eq. 9 for  $\tau_s = \sigma_{eq} = 0$  and  $\sigma_m = \sigma_1$ ):

$$\frac{\sigma_1}{\tau_0} = \frac{1}{q_2} \sqrt{\frac{20}{3}} \operatorname{arccosh} \left( \frac{1 + (q_1 f)^2}{2q_1 f} \right) \quad (24)$$

This limit is well verified by the FE simulations.

#### 4.5. Effect of void volume fraction $f$

The results presented above were obtained for a fixed porosity level (1%). In this section, the model and the unit cell calculations are compared for porosities equal to 0.5%, 1%, 2%, 5% and 10%. For the sake of conciseness, the comparison is limited to the case where  $\eta_2 = \eta_3$  for a main loading direction equal to  $[100]$  (equivalent to  $[110]$  for  $\eta_2 = \eta_3$ ),  $[111]$  or  $[\bar{1}25]$  (equivalent to  $[210]$  for  $\eta_2 = \eta_3$ ). Results are shown in Fig. 16. Comparisons with results corresponding to the bulk material (thin dashed lines) are also presented. It is clearly observed that, for low triaxialities, the effect of porosity on the yield surface is rather limited so that yield surfaces for the voided materials are very close to the curve for the bulk material. Despite this moderate effect, FE simulations for these triaxiality and porosity ranges are needed to calibrate parameter  $\alpha$ . The original model developed in Appendix A strongly underestimates the trends obtained using FE simulations with  $\alpha = 1$  whereas the optimized value is much larger ( $\alpha = 6.46$ ). At high triaxiality ratio, Eq. 24 appears to well represent FE simulations for the entire porosity range and all loading directions.

#### 4.6. Field of plastic slip activation around the hole

The unit cell computations do not provide only results at the macroscopic scale but also fields of plastic deformation around the hole that bring information about the deformation modes of a hole

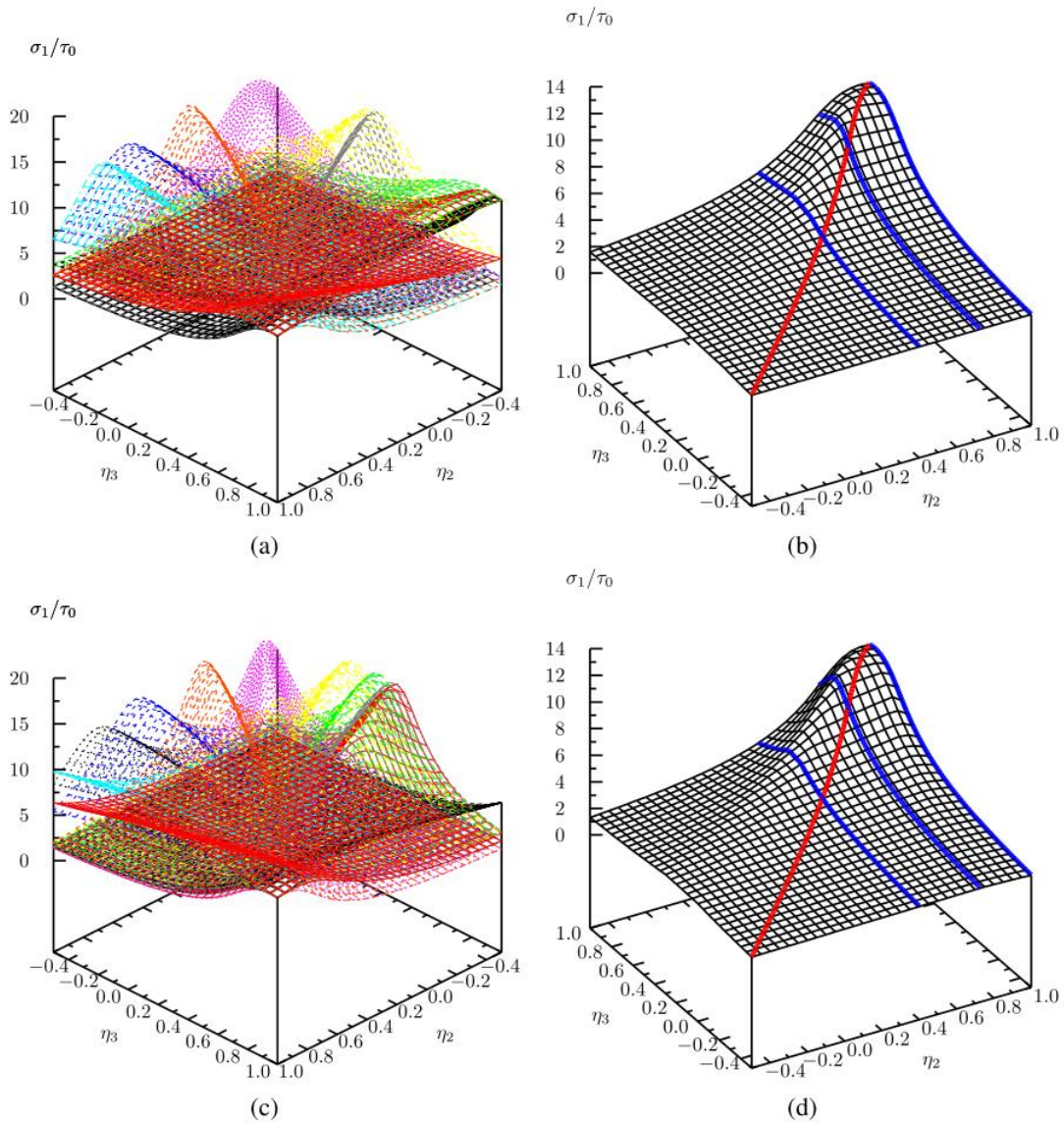


Figure 13:  $[\bar{1}25]$  loading: (a) 3D yield surfaces for each slip system for  $\mathbf{z} = [210]$ , (b) 3D yield surface for the porous single crystal for  $\mathbf{z} = [210]$ , (c) 3D yield surfaces for each slip system for  $\mathbf{z} = [(29)25]$ , (d) 3D yield surface for the porous single crystal for  $\mathbf{z} = [(29)25]$

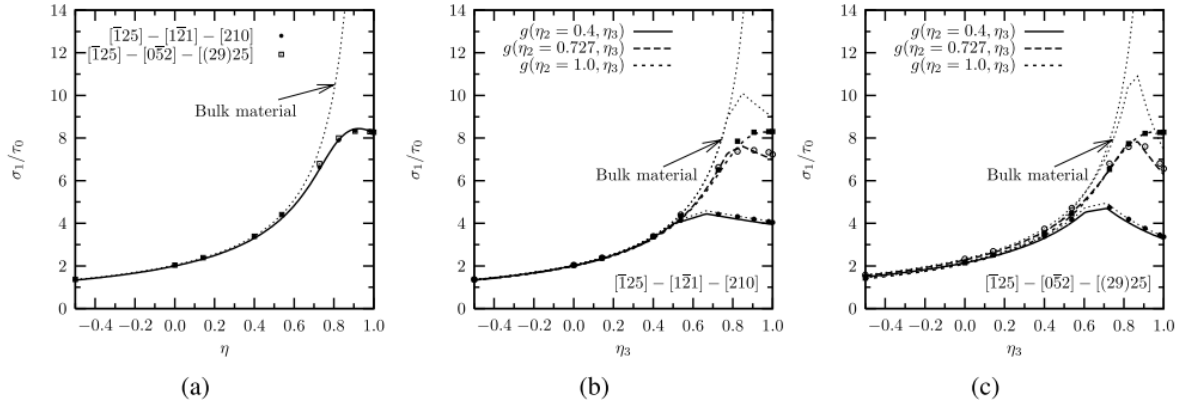


Figure 14: Yield surfaces for the porous single crystal for  $[\bar{1}25]$  loading,  $f = 0.01$ : (a)  $\eta_2 = \eta_3 = \eta$  for  $\mathbf{3} = [210]$  and  $\mathbf{3} = [(29)25]$ , (b) for  $\mathbf{3} = [210]$  and  $\eta_2 = 0.4, 0.727$  and  $1$ , (c) for  $\mathbf{3} = [(29)25]$  and  $\eta_2 = 0.4, 0.727$  and  $1$ .

in a single crystal. The impact of crystallography on the shape evolution of a hole in a single crystal matrix during growth was studied by Yerra et al. (2010) within the framework of finite deformation crystal plasticity. Since the limit analysis provided in the present work is limited to small strain, the shape changes are not illustrated here. Instead, maps are now provided showing the activation of slip systems around the hole depending on crystal orientation and prescribed stress triaxiality. For that purpose, the total cumulative slip  $\gamma_{cum}$  is defined as the sum of all the cumulative slip variables  $\gamma^s$ :

$$\gamma_{cum} = \sum_{s=1}^{12} \gamma^s \quad (25)$$

The field of total cumulative slip is illustrated in Fig. 17 for three different crystal orientations and three triaxiality levels for fixed values of porosity (1%) and mean strain. The pictures show middle cross-sections of the unit cell in the  $\mathbf{1}$ – $\mathbf{2}$  plane, where 1 and 2 refer to the two first crystal directions indicated in the orientation of the cell. The inhomogeneity of plastic slip appears clearly in these maps with an obvious symmetry of the deformation patterns for the  $[100] - [010] - [001]$  orientation, in contrast to the two other ones where symmetry is broken.

Figure 18 shows the activation of the 12 slip systems around the hole in the case of an imposed triaxiality of 1.5, for the specific orientation  $[111] - [\bar{2}11] - [0\bar{1}1]$  with a given overall strain level. It turns out that all the slip systems are activated at some places, mainly around the North and South poles on the figure where multiple slip is observed. The fact that the twelve slip systems are activated at some place in the unit cell in contrast to the corresponding bulk single crystal is probably one reason why the von Mises equivalent stress must be introduced in the proposed yield function (Eq. 8) in addition to the resolved shear stress.

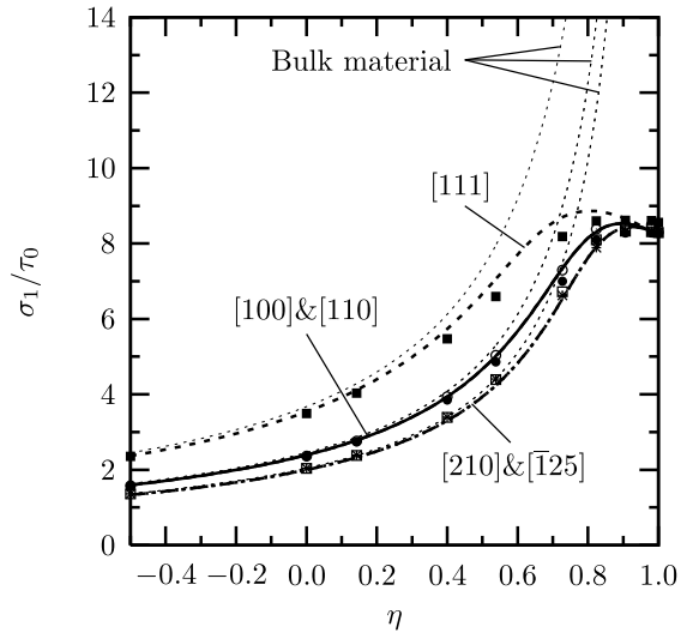


Figure 15: Effect of the main loading direction  $\mathbf{1}$  on the yield surface for the porous single crystal, in the case with  $\eta_2 = \eta_3 = \eta$ ,  $f = 0.01$ .

## 5. Conclusion

The original contribution of the present work to the modeling of ductile fracture in single crystals is to provide a yield function in closed form for porous single crystals and to validate it by means of systematic unit cell computations. It is theoretically motivated using a variational micromechanical approach. It is formulated as the combination of  $N$  yield criteria,  $N$  being the number of potential slip systems in the single crystal matrix, based on the definition of a new effective equivalent stress measure for each slip system. This equivalent stress measure incorporates in a nonlinear way the resolved shear stress on the considered slip system and the equivalent von Mises and mean stresses. To better match an exponential dependence on the mean stress (which is well recognized for rate-independent materials), this yield function was phenomenologically extended following a procedure similar to the GTN extension of Gurson's model (Tvergaard and Needleman (1984) and Leblond et al. (1994)). The extension introduces three adjustable parameters ( $q_1$ ,  $q_2$  and  $\alpha$ ). Unit cell simulations were used to fit these parameters in the case of a FCC single crystal. Various stress triaxiality ratios, main loading directions and porosity levels were considered for the unit cell simulations. In all cases, the model was able to capture the results of the calculations with a very good accuracy, including the effects of main loading direction, of secondary loading direction and of porosity.

Further work will include the analysis of the plastic flow rule associated with the proposed yield

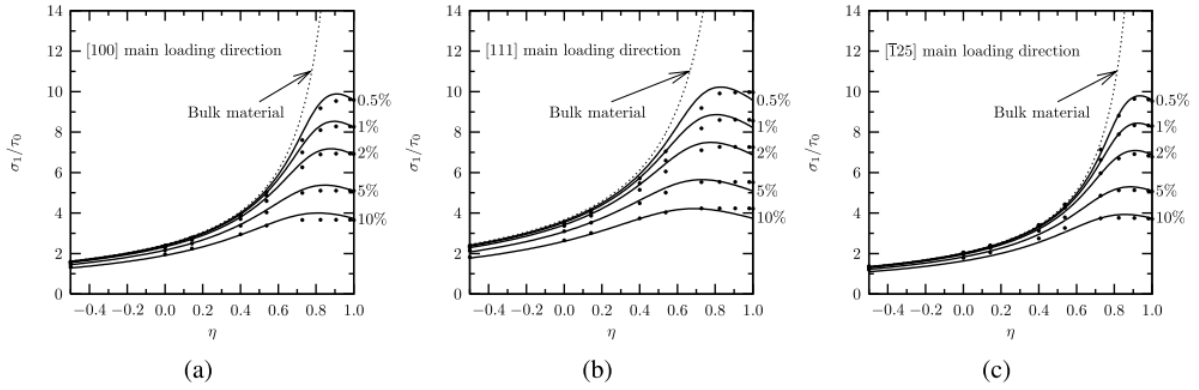


Figure 16: Effect of porosity from 0.5% to 10% for various main loading directions, with  $\eta_2 = \eta_3 = \eta$ : (a) [100] main loading direction; (b) [111] main loading direction; (c)  $[\bar{1}25]$  main loading direction.

function. In particular, the validity of the normality rule Eq. 10 will be tested for this new yield criterion. In addition, the porosity growth rate ( $\dot{f} = (1 - f)\text{trace}(\dot{\underline{\epsilon}}_p)$ ) will be investigated by comparing the results of the model and unit cell simulations. It is well-known that crystallographic aspects of plastic deformation around holes strongly affect their growth rate, for example in H.C.P. metals, see Crépin et al. (1996). The proposed yield function will then be used to develop a set of constitutive equations for the porous single crystal including self and cross-hardening within a finite strain framework. A first application of this model will be the evaluation of the fracture toughness properties in presence of swelling in irradiated stainless steels.

### Appendix A. Development of a model for voided viscous single crystals

In this section a model is developed for viscous single crystals containing spherical voids. The single crystal is assumed to have a nonlinear viscous behaviour with  $N$  slip systems. Following DeBotton and Ponte Castañeda (1995) each slip system is associated to a slip potential function  $\phi_s$  defined as:

$$\phi_s = \frac{\dot{\gamma}_0 \tau_0}{n + 1} \left| \frac{\tau_s}{\tau_0} \right|^{n+1} \quad (\text{A.1})$$

where  $\dot{\gamma}_0 (> 0)$  and  $\tau_0 (> 0)$ , respectively, are the reference slip rate and the reference flow stress of slip system  $s$ . The creep exponent is denoted by  $n$  and  $\tau^s$  is the resolved shear stress on the slip system  $s$ , given by:

$$\tau_s = \underline{\sigma} : \underline{m}_s \quad (\text{A.2})$$



where  $\underline{m}_s$  is the orientation tensor defined by Eq. 1. The overall stress potential of the single crystal is the sum of the potentials for all slip systems:

$$\Phi(\underline{\sigma}) = \sum_{s=1}^N \phi_s(\tau_s) \quad (\text{A.3})$$

As defined in Eq. A.1,  $\phi_s$  is a power law function which is strictly convex.

Based on the work by DeBotton and Ponte Castañeda (1995), a stress potential for a linear comparison single crystal is introduced as:

$$\Phi_L(\underline{\sigma}) = \frac{1}{2} \underline{\sigma} : \mathbb{M}^\chi : \underline{\sigma} = \sum_{s=1}^N \alpha_s \tau_s^2 \quad (\text{A.4})$$

where  $\alpha_s$  denotes the slip system compliance. The fourth-order compliance tensor is written as:

$$\mathbb{M}^\chi = 2 \sum_{s=1}^N \alpha_s \underline{m}_s \otimes \underline{m}_s = 2 \sum_{s=1}^N \alpha_s \mathbb{R}_s \quad (\text{A.5})$$

Then, according to DeBotton and Ponte Castañeda (1995) dual potentials are defined as:

$$\phi_s(\tau_s) = \max_{\alpha_s \geq 0} \{ \alpha_s \tau_s^2 - V_s(\alpha_s) \} \quad (\text{A.6})$$

$$V_s(\alpha_s) = \max_{\tau_s \geq 0} \{ \alpha_s \tau_s^2 - \phi_s(\tau_s) \} \quad (\text{A.7})$$

Using Eq. A.1 together with Eq. A.7, by taking account of the convexity of the viscous potential with  $n > 1$ , the function  $V_s$  can be explicitly expressed as:

$$V_s(\alpha_s) = \frac{n-1}{n+1} \frac{\dot{\gamma}_0 \tau_0}{2} \left( \frac{2\tau_0 \alpha_s}{\dot{\gamma}_0} \right)^{\frac{n+1}{n-1}} \quad (\text{A.8})$$

Based on this constitutive model for the single crystal, the porous single crystal can be further described introducing a variational characterization as proposed in (Ponte Castañeda, 1991, 1992a). The effective stress potential for the “composite” (i.e. single crystal + voids) is derived from the theorem of minimum complementary potential energy, by the following relation:

$$\bar{\Phi}(\underline{\Sigma}) = \min_{\underline{\sigma}(\vec{x}) \in \mathcal{S}} \int_{\Omega} \Phi(\underline{\sigma}(\vec{x})) d\Omega \quad (\text{A.9})$$

with  $\Omega$  being the representative volume element containing voids and the metallic matrix,  $\underline{\Sigma}$  the macroscopic stress tensor defined as the average over the total volume  $\underline{\Sigma} = \langle \underline{\sigma}(\vec{x}) \rangle_{\Omega}$ , and  $\mathcal{S}$  the set of Statically Admissible (S.A.) stress fields with a homogeneous stress boundary condition on the outer boundary  $\partial\Omega$  of  $\Omega$ :  $\underline{\sigma}(\vec{x})$  S.A.  $\iff \underline{\sigma} \in \mathcal{S}$  with  $\mathcal{S} = \{ \text{div}(\underline{\sigma}) = \vec{0} \text{ in } \Omega \text{ and } \underline{\sigma} \cdot \vec{n} = \underline{\Sigma} \cdot \vec{n} \text{ on } \partial\Omega \}$  where  $\vec{n}$  is the outer normal to the boundary,  $\partial\Omega$ , of  $\Omega$ .

Following Ponte Castañeda (1992b) and Ponte Castañeda and Zaidman (1996), the effective potential can be estimated as:

$$\bar{\Phi}(\underline{\Sigma}) \geq \max_{\{\alpha_r \geq 0\}_{r=1,N}} \left( \bar{\Phi}_L(\underline{\Sigma}) - (1-f) \sum_{s=1}^N V_s(\alpha_s) \right) \quad (\text{A.10})$$

where  $\bar{\Phi}_L(\underline{\Sigma})$  denotes any estimate of the potential of the linear composite.  $\bar{\Phi}_L$  can be expressed as:

$$\bar{\Phi}_L(\underline{\Sigma}) = \frac{1}{2} \underline{\Sigma} : \bar{\mathbb{M}} : \underline{\Sigma} \quad (\text{A.11})$$

where  $\bar{\mathbb{M}}$  is an estimate of the effective viscous compliance fourth order tensor of the “composite”. In Eq. A.10 it has been assumed that the slip system compliance  $\alpha_s$  can be considered as identical for each slip system of the single crystal and independent of the position in  $\Omega$ . Furthermore, the  $(1-f)$  factor accounts for the fact that only a fraction of the composite corresponds to the single crystal. The remainder (i.e.  $f$ ) corresponds to voids for which the  $V$  function is equal to zero.

In the following, Eq. A.10 will be regarded as an equality in order to obtain an estimate of the potential of the composite (Ponte Castañeda and Zaidman, 1996). To proceed it is also necessary to select a proper estimate of the effective stress potential of the linear comparison single crystal ( $\bar{\Phi}_L$ ). In the following a Hashin-Shtrikman lower bound will be used. In that case the effective viscous compliance tensor  $\bar{\mathbb{M}}$  (referred to as  $\bar{\mathbb{M}}^{\text{HS-}}$ ) is given by the following equation (DeBotton and Ponte Castañeda, 1995):

$$[\bar{\mathbb{M}}^{\text{HS-}} + \mathbb{M}^*]^{-1} = (1-f) [\mathbb{M}^\chi + \mathbb{M}^*]^{-1} + f [\mathbb{M}^v + \mathbb{M}^*]^{-1} \quad (\text{A.12})$$

where  $\mathbb{M}^v$  is the compliance tensor of the voids.  $\mathbb{M}^*$  is the inverse of the influence tensor of Hill for a spherical void. As the bulk and shear moduli of the void are equal to zero, Eq. A.12 leads to:

$$\bar{\mathbb{M}}^{\text{HS-}} = \frac{1}{1-f} \mathbb{M}^\chi + \frac{f}{1-f} \mathbb{M}^* \quad (\text{A.13})$$

The inverse of the influence tensor of Hill can easily be computed in the case of an isotropic compliance matrix which is expressed as <sup>2</sup>:

$$\mathbb{M}_0 = \frac{1}{3\kappa_0} \mathbb{J} + \frac{1}{2\mu_0} \mathbb{K} \quad (\text{A.14})$$

In the case where the matrix material can be considered as incompressible (i.e.  $\kappa_0 \rightarrow \infty$ ), the tensor  $\mathbb{M}^*$  is found to be:

$$\mathbb{M}^* = \frac{1}{4\mu_0} \mathbb{J} + \frac{1}{3\mu_0} \mathbb{K} \equiv \frac{1}{3\kappa^*} \mathbb{J} + \frac{1}{2\mu^*} \mathbb{K} \quad (\text{A.15})$$

<sup>2</sup> $\mathbb{J}$  and  $\mathbb{K}$  are fourth order tensors such that:  $\mathbb{J} : \underline{a} = \frac{1}{3} a_{kk} \underline{1}$  and  $\mathbb{K} : \underline{a} = \underline{a} - \frac{1}{3} a_{kk} \underline{1}$  (deviator of  $\underline{a}$ ) for any second order tensor  $\underline{a}$ .

In the following  $\mathbb{M}_0$  (defined by the shear modulus  $\mu_0$  only) will be used instead of  $\mathbb{M}^x$  to compute  $\mathbb{M}^*$ , since no direct expression for  $\mathbb{M}^*$  as a function of  $\mathbb{M}^x$  is available. A suitable value for  $\mu_0$  must consequently be used. In that case the lower bound character of the model is lost. As a first approximation, it is assumed that the deviatoric projections of  $\mathbb{M}^x$  and  $\mathbb{M}_0$  are equal so that:

$$\mathbb{M}^x :: \mathbb{K} = \mathbb{M}_0 :: \mathbb{K} \quad (\text{A.16})$$

Noting that  $\mathbb{K} :: \mathbb{K} = 5$  and that  $\mathbb{R}_s :: \mathbb{K} = \frac{1}{2}$ ,  $\forall s$ , one finally obtains from A.5 and A.14 :

$$\mu_0 = \frac{5}{2 \sum_s \alpha_s} \quad (\text{A.17})$$

Using relation A.13, the effective stress potential of the porous linear comparison single crystal can be approximated as:

$$\begin{aligned} \bar{\Phi}_L(\underline{\Sigma}) &= \frac{1}{2} \underline{\Sigma} : \bar{\mathbb{M}}^{\text{HS}^-} : \underline{\Sigma} = \frac{1}{2} \underline{\Sigma} : \left( \frac{1}{1-f} \mathbb{M}^x + \frac{f}{1-f} \mathbb{M}^* \right) : \underline{\Sigma} \\ &= \frac{1}{1-f} \left( \sum_s \alpha_s T_s^2 + f \bar{\Phi}^*(\underline{\Sigma}) \right) \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

where  $T_s = \underline{\Sigma} : \underline{m}^s$  is the macroscopic resolved shear stress of the slip system  $s$  for the non-linear single crystal and  $\bar{\Phi}^*(\underline{\Sigma})$  is derived from A.11 and A.15:

$$\bar{\Phi}^*(\underline{\Sigma}) = \frac{1}{2\kappa^*} \Sigma_m^2 + \frac{1}{6\mu^*} \Sigma_{eq}^2 \quad (\text{A.19})$$

where  $\Sigma_m$  (resp.  $\Sigma_{eq}$ ) is the mean stress (resp. von Mises stress) of the macroscopic stress tensor  $\underline{\Sigma}$ . Note that  $\bar{\Phi}^*$  is expressed using isotropic invariants of  $\underline{\Sigma}$  because  $\mathbb{M}_0$  is assumed to be isotropic as a first approximation. Finally  $\bar{\Phi}_L$  can be expressed as:

$$\bar{\Phi}_L(\underline{\Sigma}) = \frac{1}{1-f} \sum_{s=1}^N \left\{ \alpha_s \left[ T_s^2 + f \left( \frac{3}{20} \Sigma_m^2 + \frac{2}{45} \Sigma_{eq}^2 \right) \right] \right\} \quad (\text{A.20})$$

It follows that the estimate of the effective potential  $\bar{\Phi}$  can be rewritten using A.10 and A.8 as:

$$\begin{aligned} \bar{\Phi}(\underline{\Sigma}) &= \max_{\{\alpha_r \geq 0\}_{r=1,N}} \left[ \frac{1}{1-f} \sum_{s=1}^N \left( \alpha_s \left( T_s^2 + f \left( \frac{3}{20} \Sigma_m^2 + \frac{2}{45} \Sigma_{eq}^2 \right) \right) \right) \right. \\ &\quad \left. - (1-f) \sum_{s=1}^N \frac{n-1}{n+1} \frac{\dot{\gamma}_0 \tau_0}{2} \left( \frac{2\tau_0 \alpha_s}{\dot{\gamma}_0} \right)^{\frac{n+1}{n-1}} \right] \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

At this stage of the derivation it is convenient to introduce the following quantity:

$$T_s^* = \frac{1}{1-f} \left( T_s^2 + f \left( \frac{2}{45} \Sigma_{eq}^2 + \frac{3}{20} \Sigma_m^2 \right) \right)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{A.22})$$

In order to maximize the right hand-side of Eq. A.21 one needs to solve the system of equations formed by the vanishing of the partial derivatives of the argument of the Max operator in (A.21) with respect to  $\alpha_s, \forall s$ . This leads to:

$$\alpha_s = \frac{\dot{\gamma}_0}{2\tau_0} \left( \frac{T_s^*}{\tau_0} \right)^{n-1} \quad (\text{A.23})$$

Introducing this solution into Eq. A.21 leads to the following expression for  $\bar{\Phi}$ :

$$\bar{\Phi}(\underline{\Sigma}) = (1 - f) \sum_s \frac{\dot{\gamma}_0 \tau_0}{n + 1} \left| \frac{T_s^*}{\tau_0} \right|^{n+1} \equiv \sum_s \bar{\phi}_s(T_s^*) \quad (\text{A.24})$$

Based on this equation, effective slip systems can be attributed to the homogenized porous single crystal whereby  $T_s^*$  can be interpreted as an effective scalar resolved stress acting on each slip system. Rate independent plasticity is obtained for  $n \rightarrow +\infty$ . The yield surface for each slip system is then expressed as:  $T_s^* - \tau_0 = 0$ .

## References

- Bandstra, J., Koss, D., 2008. On the influence of void clusters on void growth and coalescence during ductile failure. *Acta Materialia* 56, 4429–4439.
- Benzerger, A., Besson, J., Pineau, A., 2004. Anisotropic ductile fracture: Part II: theory. *Acta Metall.* 52, 4639–4650.
- Benzerger, A., Leblond, J., 2010. Ductile fracture by void growth to coalescence. *Adv. Appl. Mech.* 44, 169–305.
- Benzerger, A. A., Besson, J., 2001. Plastic potentials for anisotropic porous solids. *Eur. J. Mech./A* 20 (3), 397 – 434.
- Besson, J., 2010. Continuum models of ductile fracture: A review. *Int. J. Damage Mech.* 19 (1), 3–52.
- Besson, J., Cailletaud, G., Chaboche, J.-L., Forest, S., Blétry, M., 2009. *Non-Linear Mechanics of Materials. Series: Solid Mechanics and Its Applications, Vol. 167*, Springer.
- Besson, J., Foerch, R., 1998. Application of object-oriented programming techniques to the finite element method. Part I-General concepts. *Revue Européenne des Elements Finis* 7 (5), 535–566.
- Besson, J., Steglich, D., Brocks, W., 2001. Modeling of crack growth in round bars and plane strain specimens. *Int. J. Solids Structures* 38 (46–47), 8259–8284.

- Brocks, W., Sun, D. Z., Honig, A., 1995. Verification of the transferability of micromechanical parameters by cell model calculations with visco-plastic materials. *Int. J. Plasticity* 11 (8), 971 – 989.
- Crépin, J., Bretheau, T., Caldemaison, D., 1996. Cavity growth and rupture of  $\beta$ -treated zirconium: A crystallographic model. *Acta Mat.* 44, 4927–4935.
- Danas, K., Ponte Castañeda, P., 2009. A finite-strain model for anisotropic viscoplastic porous media: I-Theory. *Eur. J. Mechanics A/Solids* 28, 387–401.
- DeBotton, G., Ponte Castañeda, P., 1995. Variational estimates for the creep behaviour of polycrystals. *Proc. R. Soc. London Ser. A-Math. Phys. Sci.* 448, 121–142.
- Dubuisson, P., 2011. Le gonflement des aciers austénitiques. *Revue de Métallurgie* 108, 33–37.
- Fabrègue, D., Pardoën, T., 2008. A constitutive model for elastoplastic solids containing primary and secondary voids. *J. Mech. Phys. Solids* 56, 719–741.
- Faleskog, J., Gao, X., Shih, C., 1998. Cell model for nonlinear fracture analysis — I. Micromechanics calibration. *Int. J. Frac.* 89, 355–373.
- Faleskog, J., Shih, C., 1997. Micromechanics of coalescence — I. Synergistic effects of elasticity, plastic yielding and multi-size-scale voids. *J. Mech. Phys. Solids* 45 (1), 21–50.
- Foerch, R., Besson, J., Cailletaud, G., Pilvin, P., 1997. Polymorphic constitutive equations in finite element codes. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 141, 355–372.
- Foster, J. P., Strain, R. V., 1974. Empirical swelling equations for solution-annealed type 304 stainless steel. *Nuclear Technology*, 93–98.
- Fritzen, F., Forest, S., Boehlke, T., Kondo, D., Kanit, T., 2012. Computational homogenization of elasto-plastic porous metals. *Int. J. Plasticity* 29, 102–119.
- Gan, Y., Kysar, J., 2007. Cylindrical void in a rigid-ideally plastic single crystal III: Hexagonal close-packed crystal. *Int. J. Plasticity* 23 (4), 592–619.
- Gan, Y., Kysar, J., Morse, T., 2006. Cylindrical void in a rigid-ideally plastic single crystal II: Experiments and simulations. *Int. J. Plasticity* 22, 39–72.
- Gao, X., Faleskog, J., Shih, C., 1998. Cell model for nonlinear fracture analysis — ii. fracture-process calibration and verification. *Int. J. Frac.* 89, 375–398.
- Goldstein, H., Poole, C., Safko, J., 2002. *Classical mechanics*. Third Edition. Addison Wesley.

- Gologanu, M., Leblond, J.-B., 1993. Approximate models for ductile metals containing non-spherical voids - Case of axisymmetric prolate ellipsoidal cavities. *J. Mech. Phys. Solids* 41, 1723–1754.
- Gurson, A., 1977. Continuum theory of ductile rupture by void nucleation and growth: Part I—Yield criteria and flow rules for porous ductile media. *J. Engng Mater. Technol.* 99, 2–15.
- Ha, S., Kim, K., 2010. Void growth and coalescence in F.C.C. single crystals. *Int. J. Solids Structures* 52 (7), 863 – 873.
- Huang, M., Li, Z., Wang, C., 2007. Discrete dislocation dynamics modelling of microvoid growth and its intrinsic mechanism in single crystals. *Acta Mat.* 55, 1387–1396.
- Huang, M., Zhao, L., Tong, J., 2012. Discrete dislocation dynamics modelling of mechanical deformation of nickel-based single crystal superalloys. *Int. J. Plasticity* 28, 141–158.
- Hussein, M., Borg, U., Niordson, C., Deshpande, V., 2008. Plasticity size effects in voided crystals. *J. Mech. Phys. Solids* 56, 114–131.
- Koplik, J., Needleman, A., 1988. Void growth and coalescence in porous plastic solids. *Int. J. Solids Structures* 24 (8), 835 – 853.
- Kuna, M., Sun, D. Z., 1996. Three-dimensional cell model analyses of void growth in ductile materials. *Int. J. Frac.* 81 (3), 235 – 258.
- Kysar, J., Gan, Y., Mendez-Arzuza, G., 2005. Cylindrical void in a rigid-ideally plastic single crystal. Part I: Anisotropic slip line theory solution for face-centered cubic crystals. *Int. J. Plasticity* 21 (8), 1481–1520.
- Lebensohn, R., Idiart, M., Ponte Castañeda, P., Vincent, P.-G., 2011. Dilatational viscoplasticity of polycrystalline solids with intergranular cavities. *Phil. Mag.* 91 (22), 3038 – 3067.
- Leblond, J., Perrin, G., Suquet, P., 1994. Exact results and approximate models for porous viscoplastic solids. *Int. J. Plasticity* 10 (3), 213 – 235.
- Lecarme, L., Tekoğlu, C., Pardoën, T., 2011. Void growth and coalescence in ductile solids with stage III and stage IV strain hardening. *Int. J. Plasticity* 27 (8), 1203–1223.
- Liu, W., He, Z., Tang, J., Hu, Z., Cui, D., 2012. The effects of load condition on void coalescence in FCC single crystals. *Comput. Mat. Sci.* 60, 66–74.
- Liu, W., Huang, H., Tang, J., 2010. FEM simulation of void coalescence in FCC crystals. *Comput. Mat. Sci.* 50, 411–418.

- Liu, W. H., Zhang, X. M., Tang, J. G., Du, Y. X., 2007. Simulation of void growth and coalescence behavior with 3d crystal plasticity theory. *Comput. Mat. Sci.* 40 (1), 130 – 139.
- Liu, Y., Gilormini, P., Ponte Castañeda, P., 2005. Homogenization estimates for texture evolution in halite. *Tectonophys* 406, 179–195.
- Mc Clintock, F., 1968. A criterion for ductile fracture by the growth of holes. *J. App. Mech.* 35, 363–371.
- Monchiet, V., Cazacu, O., Charkaluk, E., Kondo, D., 2008. Macroscopic yield criteria for plastic anisotropic materials containing spheroidal voids. *Int. J. Plasticity* 24, 1158 – 1189.
- Monchiet, V., Charkaluk, E., Kondo, D., 2007. An improvement of gurson-type models of porous materials by using eshelby-like trial velocity fields. *C. R. Acad. Sci. Paris* 335 (1), 32 – 41.
- Needleman, A., 1972. Void growth in an elastic-plastic medium. *J. Applied Mech.* 39 (4), 964 – 970.
- Pardoen, T., Hutchinson, J. W., 2000. An extended model for void growth and coalescence. *J. Mech. Phys. Solids* 48 (12), 2467 – 2512.
- Pineau, A., Pardoen, T., 2007. Failure mechanisms of metals. Chapter 6. Elsevier.
- Ponte Castañeda, P., 1991. The effective mechanical properties of nonlinear isotropic composites. *J. Mech. Phys. Solids* 39 (1), 45 – 71.
- Ponte Castañeda, P., 1992a. New variational principles in plasticity and their application to composite materials. *J. Mech. Phys. Solids* 40 (8), 1757 – 1788.
- Ponte Castañeda, P., 1992b. A new variational principle and its application to nonlinear heterogeneous systems. *SIAM J. Appl. Math.* 52 (5), 1321 – 1341.
- Ponte Castañeda, P., Suquet, P., 1998. Nonlinear composites. *Advances in applied mechanics* 34, 171–302.
- Ponte Castañeda, P., Zaidman, M., 1996. The finite deformation of nonlinear composite materials -I. Instantaneous constitutive relations. *Int. J. Solids Structures* 33 (9), 1271 – 1286.
- Potirniche, G., Horstemeyer, M., Wagner, G., Gullett, P., 2006. A molecular dynamics study of void growth and coalescence in single crystal nickel. *Int. J. Plasticity* 22, 257–278.
- Quinn, D. F., Connolly, P. J., Howe, M. A., McHugh, P. E., 1997. Simulation of void growth in wc-co hardmetals using crystal plasticity theory. *Int. J. Mech. Sci.* 39 (2), 173 – 183.

- Renault, A., Malaplate, J., Pokor, C., Gavaille, P., 2011. TEM and EFTEM characterization of solution annealed 304l stainless steel irradiated in PHENIX, up to 36 dpa and at 390°C. *J. Nucl. Mat.* 421, 124–131.
- Rice, J., Tracey, D., 1969. On the ductile enlargement of voids in triaxial stress fields. *J. Mech. Phys. Solids* 17, 201–217.
- Schacht, T., Untermann, N., Steck, E., 2003. The influence of crystallographic orientation on the deformation behaviour of single crystals containing microvoids. *Int. J. Plasticity* 19, 1605–1626.
- Segurado, J., Llorca, J., 2009. An analysis of the size effect on void growth in single crystals using discrete dislocation dynamics. *Acta Mat.* 57, 1427–1436.
- Segurado, J., Llorca, J., 2010. Discrete dislocation dynamics analysis of the effect of lattice orientation on void growth in single crystals. *Int. J. Plasticity* 26, 806–819.
- Seran, J., Le Naour, L., Grosjean, P., Hugon, M., Carteret, Y., Maillard, A., 1984. Swelling and microstructure of neutron-irradiated Ti-modified type 316 stainless steel. *Proc. of the 12th Int. Conf. on Effects of Radiation on Materials (Williamsburg 1984), ASTM STP 870*, 233–247.
- Steglich, D., Brocks, W., 1997. Micromechanical modelling of the behaviour of ductile materials including particles. *Comput. Mat. Sci.* 9, 7–17.
- Steglich, D., Siegmund, T., Brocks, W., 1999. Micromechanical modeling of damage due to particle cracking in reinforced metals. *Comput. Mat. Sci.* 16, 404–413.
- Tang, T., Kim, S., Horstemeyer, M., 2010a. Fatigue crack growth in magnesium single crystals under cyclic loading: Molecular dynamics simulation. *Comput. Mat. Sci.* 48, 426–439.
- Tang, T., Kim, S., Horstemeyer, M., 2010b. Molecular dynamics simulations of void growth and coalescence in single crystal magnesium. *Acta Mat.* 58, 4742–4759.
- Traiviratana, S., Bringa, E., Benson, D., Meyers, M., 2008. Void growth in metals: Atomistic calculations. *Acta Mat.* 56, 3874–3886.
- Tvergaard, V., 1981. Influence of voids on shear band instabilities under plane strain conditions. *Int. J. Frac.* 17 (4), 389 – 407.
- Tvergaard, V., 1982. On localization in ductile materials containing spherical voids. *Int. J. Frac.* 18 (4), 237 – 252.
- Tvergaard, V., Needleman, A., 1984. Analysis of the cup–cone fracture in a round tensile bar. *Acta Metall.* 32, 157–169.



- Wang, Y., Yue, Z., Stein, M., 2006. Experimental and finite element study of void growth in nickel-base single crystal superalloys. *Rare Metal Mat. Eng.* 35 (1), 39–42.
- Worswick, M. J., Pick, R. J., 1990. Void growth and constitutive softening in a periodically voided solid. *J. Mech. Phys. Solids* 38 (5), 601 – 625.
- Yerra, S. K., Tekoglu, C., Scheyvaerts, F., Delannay, L., van Houtte, P., Pardoën, T., 2010. Void growth and coalescence in single crystals. *Int. J. Solids Structures* 47 (7-8), 1016 – 1029.
- Yu, Q. M., Hou, N. X., Yue, Z. F., 2010. Finite element analysis of void growth behavior in nickel-based single crystal superalloys. *Comput. Mat. Sci.* 48 (3), 597 – 608.
- Zhang, K. S., Bai, J. B., François, D., 1999. Ductile fracture of materials with high void volume fraction. *Int. J. Solids Structures* 36 (23), 3407 – 3425.
- Zhao, K., Chen, C., Shen, Y., Lu, T., 2009. Molecular dynamics study on the nano-void growth in face-centered cubic single crystal copper. *Comput. Mat. Sci.* 46, 749–754.

**List of Tables**

1	Slip systems in FCC single crystals . . . . .	6
2	Material parameters for FE simulations . . . . .	6
3	Crystallographic orientations for numerical simulations and corresponding Euler angles. . . . .	10
4	Triaxialities applied for FE simulations and values of corresponding model parameter $\eta$ . . . . .	11
5	List of all the performed unit cell FE calculations. . . . .	11
6	Adjusted values of model parameters. . . . .	11

**List of Figures**

1	Unit cell with a spherical void in its center. (a) FE mesh for $f = 0.01$ , with a cut of $1/8$ of the full geometry; (b) half of the full geometry showing the dimensions of the unit cell with a central void. . . . .	7
2	Normalized macroscopic stresses along the three principal loading directions as functions of the macroscopic deformation along direction $\mathbf{1}$ for $\mathbf{1} = [100]$ , $\mathbf{2} = [010]$ and $\mathbf{3} = [001]$ with $\eta_2 = 0.4$ , $\eta_3 = 0.727$ and a porosity level $f = 0.01$ . . . . .	9
3	Identification results showing comparison points between FE unit cell simulations and effective single crystal model predictions. They are contained in a 10% error cone. . . . .	12
4	3D yield surfaces for $[100] - [010] - [001]$ triaxial loading direction, with $f = 0.01$ . (a) Yield surfaces for each of the 12 slip systems; (b) Yield surface for the porous single crystal. . . . .	13
5	Yield surfaces for $[100] - [010] - [001]$ triaxial loading direction, with $f = 0.01$ . (a) Yield surface for the porous single crystal, with $\eta_2 = \eta_3 = \eta$ ( <i>i.e.</i> red curve in Fig. 4b). (b) Yield surfaces for the porous single crystal, with $\eta_2$ respectively fixed to 0.4, 0.727 and 1.0 ( <i>i.e.</i> blue curves in Fig. 4b). Thick continuous and dashed lines correspond to the yield surfaces for the proposed model. Symbols correspond to 3D unit cell FE analyses. Thin dashed lines correspond to the bulk material (non porous single crystal) obtained from the proposed model for each studied case. . . . .	14
6	3D yield surfaces for each of the 12 slip systems, with $f = 0.01$ : (a) for $[100] - [01\bar{1}] - [011]$ triaxial loading direction; (b) for $[100] - [02\bar{1}] - [012]$ triaxial loading direction. . . . .	15
7	Yield surfaces for the porous single crystal, with $f = 0.01$ : (a) for $[100] - [01\bar{1}] - [011]$ triaxial loading direction; (b) for $[100] - [02\bar{1}] - [012]$ triaxial loading direction. . . . .	15
8	Yield surfaces for $[100]$ main loading direction, in the case with $\eta_2 = \eta_3 = \eta$ , for various secondary loading directions, $f = 0.01$ . . . . .	16
9	Yield surfaces for the porous single crystal, in the cases of $\eta_2$ fixed at 0.4, 0.727 and 1.0, with $f = 0.01$ : (a) for $[100] - [01\bar{1}] - [011]$ triaxial loading direction; (b) for $[100] - [02\bar{1}] - [012]$ triaxial loading direction. . . . .	17
10	Yield surfaces for $[110] - [\bar{1}10] - [001]$ triaxial loading direction, with $f = 0.01$ . (a) 3D yield surfaces for all 12 slip systems; (b) 3D yield surface for the porous single crystal. (c) Yield surface for the porous single crystal, with $\eta_2 = \eta_3 = \eta$ ; (d) Yield surfaces for the porous single crystal, with $\eta_2$ fixed at 0.4, 0.727 and 1.0. . . . .	18

11	Yield surfaces for $[111] - [\bar{2}11] - [0\bar{1}1]$ triaxial loading direction, with $f = 0.01$ . (a) 3D yield surfaces for all 12 slip systems; (b) 3D yield surface for the porous single crystal. (c) Yield surface for the porous single crystal, with $\eta_2 = \eta_3 = \eta$ ; (d) Yield surface for the porous single crystal, with $\eta_2$ fixed at 0.4, 0.727 and 1.0. . . . .	19
12	Yield surfaces for $[210] - [\bar{1}20] - [001]$ triaxial loading direction, with $f = 0.01$ . (a) 3D yield surfaces for all 12 slip systems; (b) 3D yield surface for the porous single crystal. (c) Yield surface for the porous single crystal, with $\eta_2 = \eta_3 = \eta$ ; (d) Yield surface for the porous single crystal, with $\eta_2$ fixed at 0.4, 0.727 and 1.0. . . . .	20
13	$[\bar{1}25]$ loading: (a) 3D yield surfaces for each slip system for $\mathbf{3} = [210]$ , (b) 3D yield surface for the porous single crystal for $\mathbf{3} = [210]$ , (c) 3D yield surfaces for each slip system for $\mathbf{3} = [(29)25]$ , (d) 3D yield surface for the porous single crystal for $\mathbf{3} = [(29)25]$ . . . . .	22
14	Yield surfaces for the porous single crystal for $[\bar{1}25]$ loading, $f = 0.01$ : (a) $\eta_2 = \eta_3 = \eta$ for $\mathbf{3} = [210]$ and $\mathbf{3} = [(29)25]$ , (b) for $\mathbf{3} = [210]$ and $\eta_2 = 0.4, 0.727$ and 1, (c) for $\mathbf{3} = [(29)25]$ and $\eta_2 = 0.4, 0.727$ and 1. . . . .	23
15	Effect of the main loading direction $\mathbf{1}$ on the yield surface for the porous single crystal, in the case with $\eta_2 = \eta_3 = \eta$ , $f = 0.01$ . . . . .	24
16	Effect of porosity from 0.5% to 10% for various main loading directions, with $\eta_2 = \eta_3 = \eta$ : (a) $[100]$ main loading direction; (b) $[111]$ main loading direction; (c) $[\bar{1}25]$ main loading direction. . . . .	25
17	Fields of cumulative plastic slip $\gamma_{cum}$ on all slip systems in the $\mathbf{1-2}$ plane cross-section of the unit cell, shown on non-deformed meshes, for three different orientations and three different triaxialities for an overall plastic deformation $E_{11}^p = 0.01$ . The porosity is $f = 0.01$ . . . . .	38
18	Fields of the amount of slip $\gamma^s$ on all slip systems in the $\mathbf{1-2}$ plane cross-section of the unit cell, for the orientation $[111] - [\bar{2}11] - [0\bar{1}1]$ with an imposed triaxiality level of 1.5, shown on non-deformed meshes, for an overall plastic deformation $E_{11}^p = 0.01$ . The porosity is $f = 0.01$ . The color scale is the same as in Fig. 17. . .	39

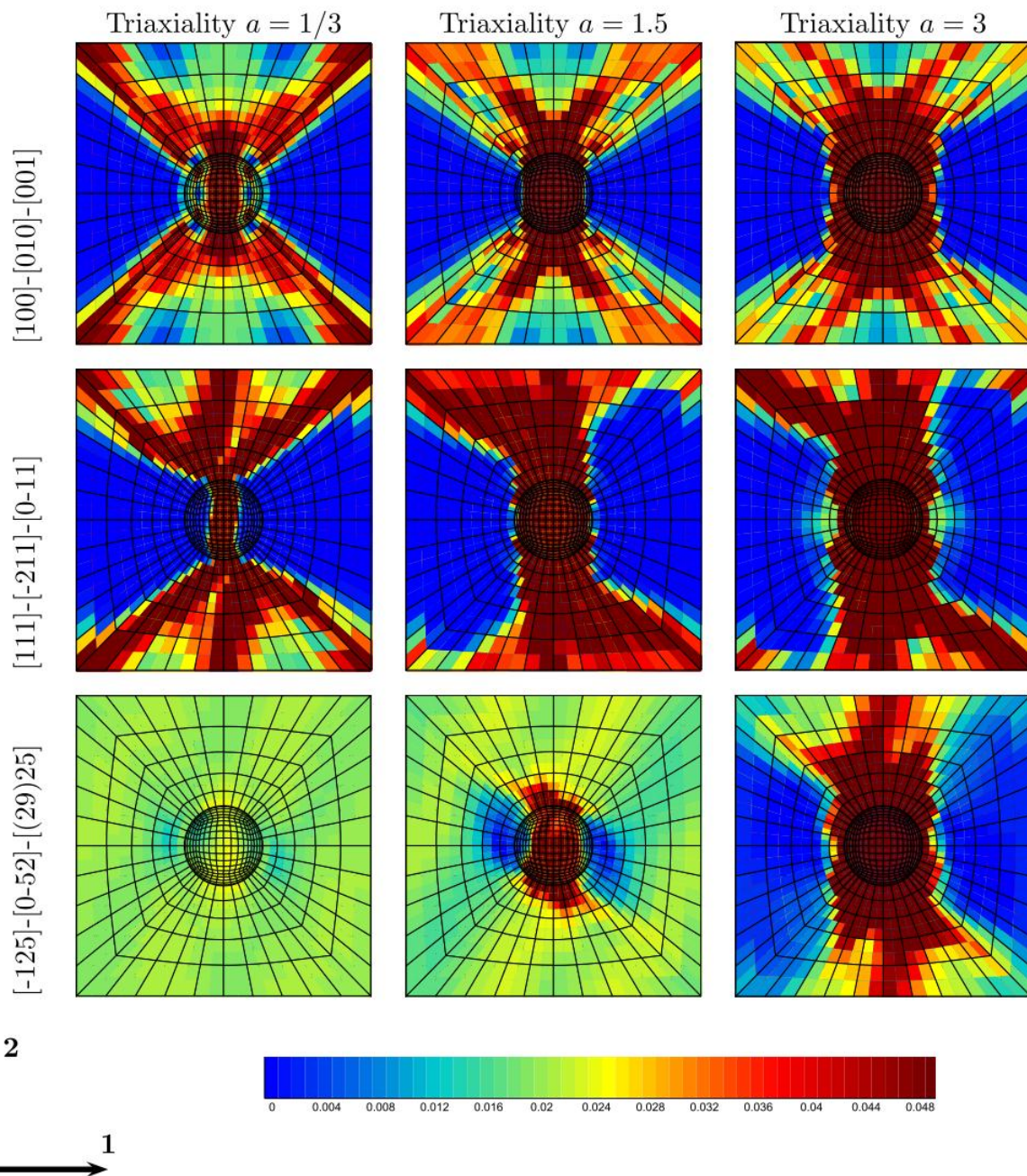


Figure 17: Fields of cumulative plastic slip  $\gamma_{cum}$  on all slip systems in the **1–2** plane cross-section of the unit cell, shown on non-deformed meshes, for three different orientations and three different triaxialities for an overall plastic deformation  $E_{11}^p = 0.01$ . The porosity is  $f = 0.01$ .

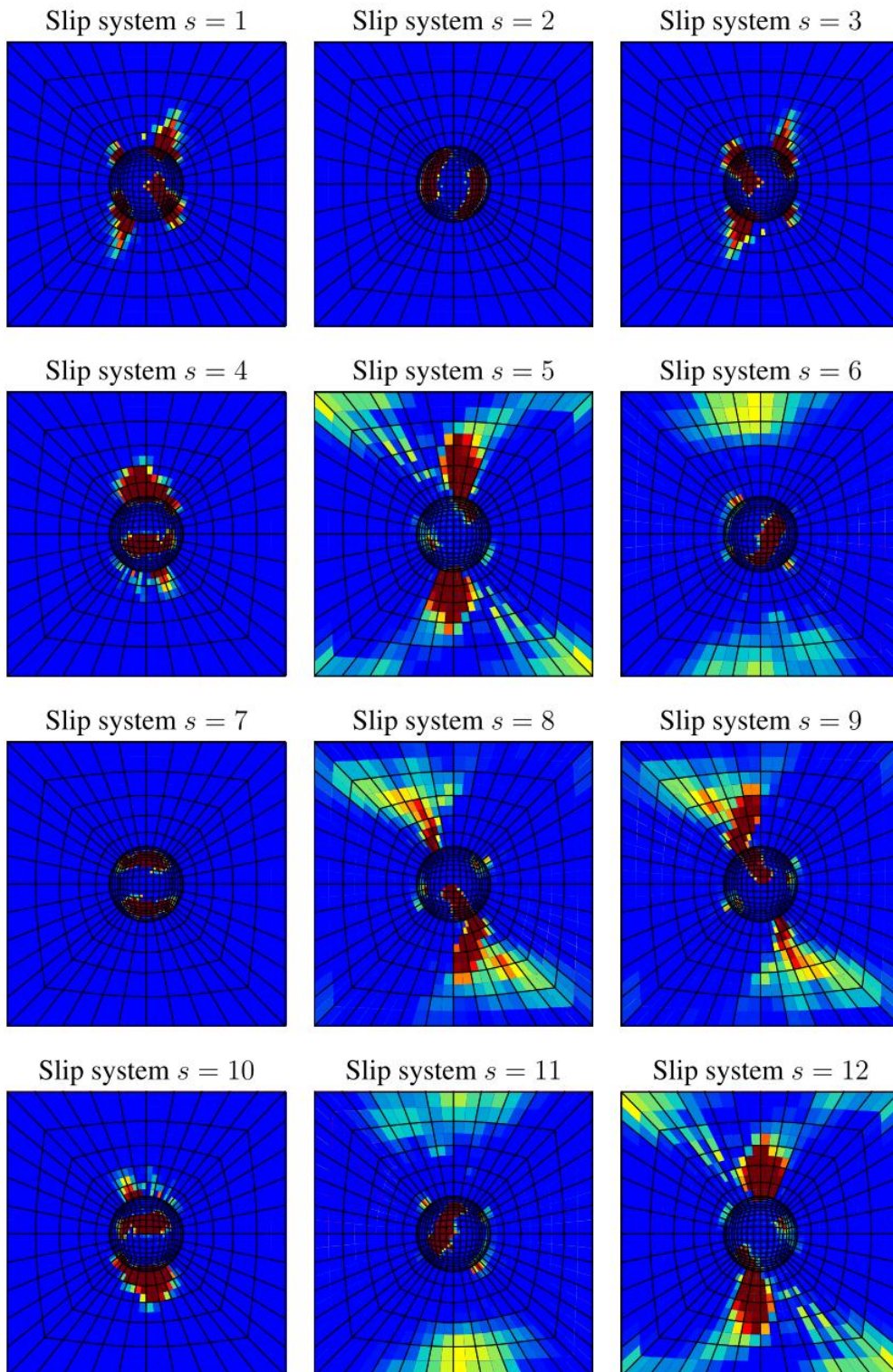


Figure 18: Fields of the amount of slip  $\gamma^s$  on all slip systems in the **1–2** plane cross-section of the unit cell, for the orientation  $[111] - [\bar{2}11] - [0\bar{1}1]$  with an imposed triaxiality level of 1.5, shown on non-deformed meshes, for an overall plastic deformation  $E_{11}^p = 0.01$ . The porosity is  $f = 0.01$ . The color scale is the same as in Fig. 17.

### 4.3 Implémentation numérique du modèle monocristallin poreux dans le code ZéBuLoN

Après avoir développé le critère de plasticité pour un monocristal poreux, le modèle monocristallin poreux couplé doit être implémenté dans le code ZéBuLoN en l'adaptant au modèle cristallin déjà implémenté en grandes transformations présenté dans le **Chapitre 2**. On garde toujours la décomposition multiplicative du tenseur gradient de la transformation  $\underline{\underline{F}} = \underline{\underline{E}} \cdot \underline{\underline{P}}$ . L'objectif final est d'évaluer l'effet de la présence des cavités sur le comportement mécanique des matériaux irradiés. On rappelle ici le critère de plasticité pour un monocristal poreux proposé dans la **Section 4.2**, en utilisant les notations correspondantes au formalisme en grandes transformations :

$$\Phi = \left( \frac{\tau^{s2}}{\tau_s^{*2}} + \alpha \frac{2}{45} f \frac{\sigma_{eq}^2}{\tau_s^{*2}} \right) + 2q_1 f \cosh \left\{ q_2 \sqrt{\frac{3}{20}} \frac{\sigma_m}{\tau_s^*} \right\} - 1 - q_1^2 f^2 \stackrel{\text{def. } \tau_s^*}{=} 0 \quad \text{Équation 4.8}$$

avec  $\tau^s$  la cission résolue de la matrice,  $\tau_s^*$  la cission résolue équivalente du matériau poreux,  $\sigma_{eq}$  la contrainte équivalente de von Mises,  $\sigma_m$  la contrainte hydrostatique,  $f$  la porosité et  $\alpha$ ,  $q_1$  et  $q_2$  les coefficients du modèle.

Notons que  $\tau^s$ ,  $\sigma_{eq}$  et  $\sigma_m$  utilisés dans le critère de plasticité sont obtenus à partir du tenseur de contrainte décrit par le tenseur de Mandel  $\underline{\underline{M}}$  dans la configuration isocline relâchée, ce qui nous permet d'appliquer la loi de Schmid, ainsi que la loi cristalline présentée ci-après.

En calculant le développement limité d'ordre 1 de l'**Équation 4.8**, on peut obtenir l'expression approximative de  $\tau_s^*$  :

$$\tau_s^* = \frac{\sqrt{900\tau^{s2} + 40\alpha f \sigma_{eq}^2 + 135q_1 f q_2^2 \sigma_m^2}}{30(1 - q_1 f)} \quad \text{Équation 4.9}$$

La valeur de  $\tau_s^*$  obtenue dans l'**Équation 4.9** permet de fournir un point de départ pour calculer la valeur exacte de  $\tau_s^*$  (avec  $\tau_s^* > 0$ ) soit par la méthode de Newton-Raphson, soit par la méthode de dichotomie, via les deux routines existantes dans le code ZéBuLoN.

Dans un premier temps, l'évolution de la forme des cavités n'est pas prise en compte dans notre modèle. Du fait que le critère développé ci-dessus est implémenté en grandes transformations, en supposant que le matériau dense n'est pas compressible et que le changement de volume est seulement dû à la déformation plastique (celui dû à la déformation élastique n'est pas un facteur d'endommagement), on obtient explicitement l'expression de la porosité :

$$\det \underline{\underline{P}} = \frac{V_p}{V_0} = \frac{V_m / (1 - f)}{V_0} = \frac{1 - f_0}{1 - f} \Rightarrow f = 1 - \frac{1 - f_0}{\det \underline{\underline{P}}}, 0 \leq f \leq 1 \quad \text{Équation 4.10}$$

avec  $f_0$  la fraction volumique initiale de cavité.

La loi d'écoulement adaptée aux matériaux poreux s'écrit alors :

$$\dot{\gamma}^s = \left\langle \frac{\tau_s^* - \tau_c^s}{K_0} \right\rangle^n \quad \text{Équation 4.11}$$

Il est à noter que la cission résolue effective  $\tau_s^*$  n'est pas signée, ce qui implique une loi d'écoulement non-signée (**Équation 4.11**). Par conséquent, les équations décrivant les évolutions des densités de dislocations et de boucles de Frank n'ont pas besoin de prendre en compte le signe de  $\dot{\gamma}^s$ . On obtient donc pour les matériaux poreux à l'état irradié :

- Modèle de « **la racine de la somme** » poreux : à partir de l'**Équation 2.20**

$$\dot{r}_D^s = \dot{\gamma}^s \left( \frac{\sqrt{\sum_u b^{su} r_D^u + K_{dl} \sum_p r_L^p}}{\kappa} - G_c r_D^s \right) \quad \text{Équation 4.12}$$

- Modèle de « **la somme des racines** » poreux : à partir de l'**Équation 2.23**

$$\dot{r}_D^s = \dot{\gamma}^s \left( \frac{\sqrt{\sum_u b^{su} r_D^u} + \sqrt{K_{dl} \sum_p r_L^p}}{\kappa} - G_c r_D^s \right) \quad \text{Équation 4.13}$$

- Evolution de  $\dot{r}_L^p$  identique pour les deux modèles présentés ci-dessus : à partir de l'**Équation 2.21**

$$\dot{r}_L^p = -A_L \left( \sum_{s \in \text{plan}(p)} r_D^s \right) (r_L^p - r_L^{\text{sat}}) \left( \sum_{s \in \text{plan}(p)} \dot{\gamma}^s \right) \quad \text{Équation 4.14}$$

Le tenseur gradient du vecteur vitesse associé au glissement plastique en grandes déformations  $\underline{\underline{L}}^p$  en prenant en compte la porosité s'exprime par :

$$\underline{\underline{L}}^p = (1-f) \sum_{s=1}^{12} \dot{\gamma}^s \underline{\underline{n}}^s, \text{ avec } \underline{\underline{n}}^s = \frac{\partial \tau_s^*}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} \quad \text{Équation 4.15}$$

Notons que  $\underline{\underline{n}}^s$  représente la direction de l'écoulement pour un matériau poreux, différente de celle pour un matériau sain  $\underline{\underline{N}}^s$  qui est fixée par la loi de Schmid.

En imposant que la variation de la surface de charge reste nulle  $\delta\Phi = 0$  pour une variation de  $\underline{\underline{\sigma}}$ , la variation de  $\tau_s^*$  est donnée par :

$$\delta\Phi = \frac{\partial \Phi}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} \cdot \delta \underline{\underline{\sigma}} + \frac{\partial \Phi}{\partial \tau_s^*} \cdot \delta \tau_s^* = 0 \quad \text{Équation 4.16}$$



A l'aide de l'Équation 4.13, la direction de l'écoulement peut être donnée par :

$$\underline{\underline{n}}^s = \frac{\partial \tau_s^*}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} = -\frac{1}{H} \cdot \underline{\underline{Q}}, \text{ avec } \underline{\underline{Q}} = \frac{\partial \Phi}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} \text{ et } H = \frac{\partial \Phi}{\partial \tau_s^*} \quad \text{Équation 4.17}$$

Les expressions de  $\underline{\underline{M}}$  et  $H$  peuvent être calculées et présentées respectivement comme suit :

$$\underline{\underline{Q}} = \frac{\partial \Phi}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} = \frac{2\tau_s^s}{\tau_s^{*2}} \underline{\underline{N}}^s + \frac{2}{15} \frac{\alpha f}{\tau_s^{*2}} \underline{\underline{s}} + \frac{2}{3} \sqrt{\frac{3}{20}} q_1 q_2 f \frac{\sinh\left(q_2 \sqrt{\frac{3}{20}} \frac{\sigma_m}{\tau_s^*}\right)}{\tau_s^*} \underline{\underline{1}} \quad \text{Équation 4.18}$$

$$H = \frac{\partial \Phi}{\partial \tau_s^*} = -2 \frac{\tau_s^{s2}}{\tau_s^{*3}} - \frac{4}{45} \alpha f \frac{\sigma_{eq}^2}{\tau_s^{*3}} - 2 \sqrt{\frac{3}{20}} q_1 q_2 f \frac{\sigma_m}{\tau_s^{*2}} \sinh\left(q_2 \sqrt{\frac{3}{20}} \frac{\sigma_m}{\tau_s^*}\right)$$

avec  $\underline{\underline{s}}$  le déviateur du tenseur des contraintes et  $\underline{\underline{1}}$  le tenseur d'identité d'ordre 2.

Les composantes dans la matrice jacobienne adaptées aux matériaux poreux sont mises à jour dans l'Annexe II. 1. Par contre, le calcul de la matrice tangente cohérente reste inchangé.

## 4.4 Tests simples sur des monocristaux non-irradié et irradié

Suite à l'implémentation du modèle monocristallin poreux dans le code ZéBuLoN, des tests simples sont réalisés afin de vérifier l'implémentation et de réaliser une étude préliminaire des influences de l'orientation cristallographique et de la porosité sur le comportement mécanique des matériaux non-irradié et irradié.

Les calculs numériques en traction simple sont réalisés sur un seul élément fini suivant 5 orientations cristallographiques représentatives pour les matériaux non-irradié et irradié avec les mêmes conditions de tests que celles utilisées dans la Section 2.5.2. Les paramètres de la loi cristalline sont pris dans le Tableau 2.5 sauf que les coefficients de la matrice d'interaction  $a^{su}$  sont choisis identiques  $a_i = 0.124$  ( $i = 1..6$ ) afin d'éviter l'apparition de l'instabilité numérique. De plus, pour le matériau irradié, l'effet d'avalanche est également introduit dans les tests avec les paramètres  $\tau_a = 20\text{MPa}$  et  $\gamma_a = 0.005$ . Les résultats obtenus pour une direction de traction suivant [001] sont présentés sur la Figure 4.1. Les résultats des calculs numériques suivant les autres directions de traction sont présentés dans l'Annexe II. 2.

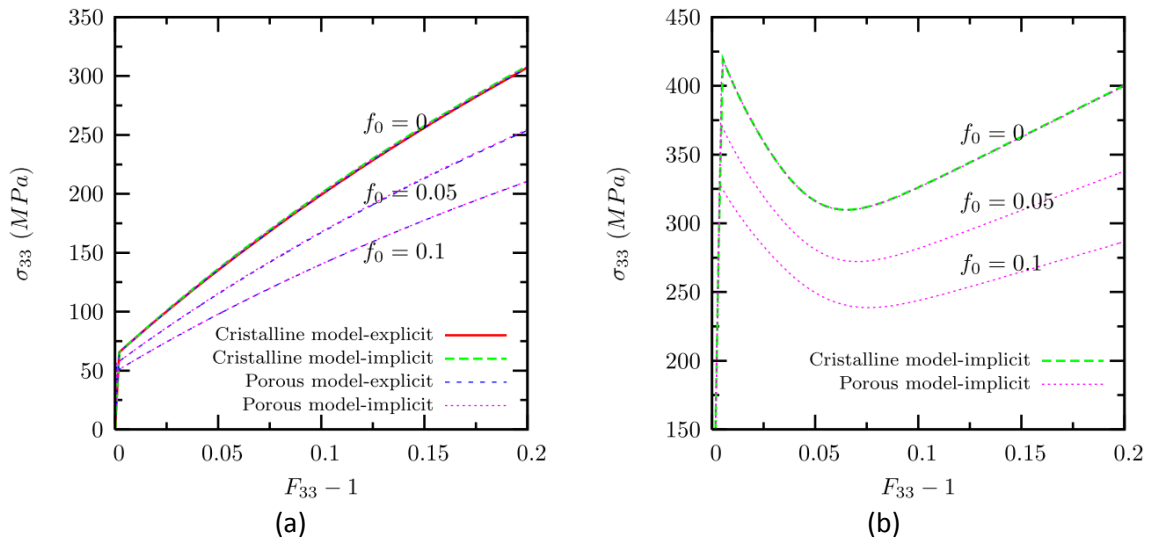


Figure 4.1 : Courbes de traction obtenues pour les matériaux (a) non-irradié et (b) irradié, sans et avec le modèle monocristallin poreux, pour différents niveaux de porosité.

D'après tous les résultats présentés ci-dessus, on peut constater que le modèle monocristallin poreux permet de décrire l'effet de porosité sur un monocristal en présence de cavités, en prenant en compte la cristallographie du monocristal. L'utilisation de ce modèle poreux ne pose pas de problème d'instabilité numérique par rapport au modèle cristallin dense. Les évolutions de porosité suivant différentes directions de traction sont tracées sur la **Figure 4.2**. Du fait que ces résultats sont obtenus à partir des calculs de traction uniaxiale, la croissance des cavités n'est pas très importante. Cependant, une influence de l'anisotropie due à la cristallographie du monocristal sur la croissance des cavités peut être observée. Celle-ci reste à vérifier à partir des calculs de cellules élémentaires.

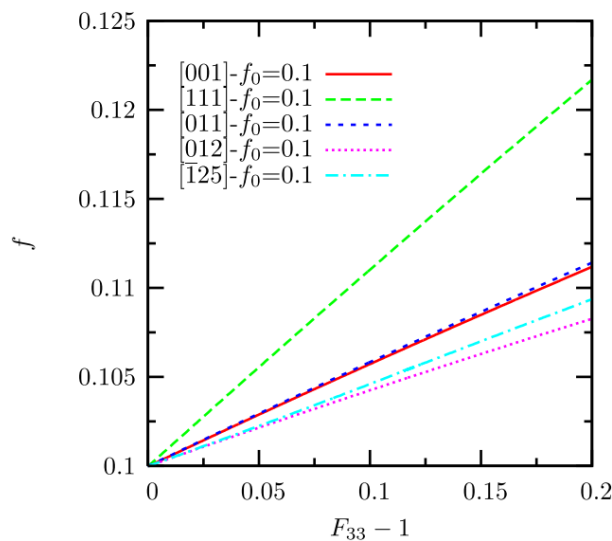


Figure 4.2 : Evolutions de porosité pour différentes orientations cristallographiques. Les résultats sont obtenus à partir des calculs de traction uniaxiale.

## 4.5 Bilan et conclusions partielles

Basé sur l'approche variationnelle de type Hashin-Shtrikman d'un monocristal linéaire de comparaison [Debotton (1995) et Bugat (2000)], un modèle de type Gurson pour les monocristaux poreux a été développé. Un terme quadratique de la cission résolue  $\tau^s$  permettant de décrire l'anisotropie liée à la cristallographie intervient dans le critère de plasticité proposé. 3 coefficients  $\alpha$ ,  $q_1$  et  $q_2$  sont introduits dans le critère et ajustés sur un grand nombre des calculs numériques réalisés sur une cellule monocristalline tri-dimensionnelle parfaitement plastique contenant une cavité sphérique au milieu de la cellule. Les effets de l'orientation cristallographique, de la triaxialité et de la porosité sont étudiés. D'après les résultats obtenus, on peut conclure que le critère de plasticité développé est capable de prédire la surface de charge d'un monocristal poreux pour tous les niveaux de triaxialité, en tenant compte des directions du chargement principale et secondaire, ainsi que l'effet de la porosité. Ce travail a fait l'objet d'un article qui a été soumis à « International Journal of Solids and Structures » en 2012.

D'après les résultats préliminaires obtenus, dans un premier temps, on peut conclure que le modèle monocristallin poreux a été bien implémenté avec les méthodes d'intégration explicite et implicite dans le code de calcul ZéBuLoN. Ce modèle poreux prend en compte les effets de l'orientation cristallographique et de la porosité. L'expression de l'évolution de la porosité est donnée explicitement à l'aide du formalisme en grandes transformations. Afin d'étudier précisément l'effet de la porosité sur l'érouissage du matériau, ainsi que la croissance et la coalescence des cavités au sein d'un monocristal, une loi d'évolution de la forme des cavités pour les monocristaux poreux doit être proposée, en comparant les résultats obtenus à partir de la cellule monocristalline poreuse.

# Conclusions et perspectives

## Conclusion générale

Le travail de recherche présenté dans ce mémoire de thèse a été consacré à la modélisation de la modification des propriétés mécaniques due à l'évolution de la microstructure par l'irradiation neutronique dans les aciers inoxydables austénitiques. Ces matériaux sont largement utilisés comme matériaux de structure et de liaison dans les internes de cuve des Réacteurs à Eau Pressurisée. Dans le cadre de cette thèse, l'étude a été orientée vers deux axes principaux : le premier concernant le développement d'une loi monocristalline à bases physiques permettant de modéliser le comportement mécanique d'un polycristal aux états non-irradié et irradié ; et le second concernant l'évaluation de l'effet du gonflement induit par l'irradiation sur les propriétés mécaniques des matériaux irradiés, dans lesquels les cavités produites par irradiation sont observées à l'échelle de la microstructure. L'ambition initiale de cette étude était de contribuer au développement d'un modèle micromécanique permettant d'évaluer l'effet du gonflement sur les propriétés mécaniques macroscopiques (plasticité et ténacité). D'un point de vue pratique, cet objectif a été atteint.

Pour répondre à ces deux axes de recherche, une étude bibliographique préliminaire a été effectuée, afin de mieux comprendre les effets d'irradiation sur l'évolution microstructurale dans les aciers inoxydables austénitiques de type 304 ou 316 à la température de 300°C, d'intérêt pour les internes de cuve dans les REP. Les boucles de Frank formées au cours de l'irradiation sont considérées comme une des origines dans le durcissement observé après irradiation dans les aciers austénitiques inoxydables. La microstructure des boucles de Frank est peu sensible aux conditions d'irradiation (avec une densité à saturation de l'ordre de grandeur de  $10^{22}m^{-3}$ ), à l'exception de la température d'irradiation. La densité de boucles de Frank augmente avec la dose et tend vers une saturation à 5-10dpa. Suite à une déformation plastique, des canaux, dits également des « bandes claires » car balayées des boucles de Frank sont observées. La formation des bandes claires (ou canaux) est considérée comme le principal mécanisme de localisation de la déformation plastique dans les aciers austénitiques inoxydables irradiés et testés dans la gamme de température à laquelle ils sont soumis dans les REP (280-380°C), ce qui conduit à un adoucissement du comportement mécanique à l'échelle macroscopique. Deux mécanismes de déformation pour les matériaux irradiés ont été identifiés sans qu'un consensus n'existe : (i) mécanisme de durcissement par barrières dispersées et d'adoucissement par canalisation et, (ii) mécanisme par blocage des sources induites par les cascades. Il apparaît que ces deux mécanismes pourraient coexister : le premier apparaît dès les faibles doses alors que le deuxième ne semble actif que pour les fortes doses (dans notre étude  $\geq 2$ dpa) car le blocage des sources de dislocations apparaît au-delà d'une densité critique d'amas de défauts ponctuels créés par les cascades.

Au cours de l'irradiation, la formation de cavités (bulles de gaz et cavités vides) nanométriques peut conduire à un gonflement macroscopique. La population de cavités montre une grande dépendance avec le spectre du réacteur, la température et la dose d'irradiation. Le phénomène de fragilisation due au gonflement n'est pas à ce jour démontré dans les conditions REP, bien que clairement mis en évidence dans les conditions RNR.

Un modèle micromécanique basé sur l'évolution des densités de dislocations et de boucles de Frank a été développé, pour les matériaux CFC non irradiés et irradiés, à l'échelle monocristalline. Les modèles de « **la racine de la somme** » et de « **la somme des racines** » ont été construits afin de rendre compte des différents couplages possibles entre densité de dislocations et densité de boucles de Frank pour décrire l'évolution de la cission critique et de la densité de dislocations. Les deux modèles cristallins ont été implémentés et validés en grandes transformations, avec deux méthodes d'intégration (implicite de Newton et explicite de Runge-Kutta), dans les codes de calcul ZéBuLoN (code E.F. utilisé au Centre des Matériaux, Mines ParisTech) et Cast3M (code E.F. utilisé au CEA). Un phénomène de bifurcation dû à une instabilité locale a été observé pour certaines conditions de calculs. Les causes de ce phénomène ont été identifiées. Les comparaisons des résultats obtenus par ZéBuLoN et Cast3M pour les matériaux aux états non-irradié et irradié présentent une bonne cohérence validant les implantations numériques réalisées.

Dans le cadre de cette étude, les démarches d'identification ont porté sur l'acier 304 Hyp, compte tenu de l'application de ce travail à l'étude de la fragilisation due au gonflement (la formation des cavités apparaît plus tôt dans l'acier 304 Hyp que dans l'acier 316 E). Les courbes de traction expérimentales de la littérature [Pokor et al. (2004c) et Pokor (2012)] pour l'acier 304L hypertrempé irradié à différents niveaux de dose ont été prises pour identifier les paramètres de la loi cristalline. Le modèle de « **la racine de la somme** » et celui de « **la somme des racines** » ont été appliqués et différentes stratégies ont été proposées pour l'identification des paramètres. L'identification a été réalisée sur un maillage d'agrégat polycristallin simplifié avec les conditions aux limites MPC. Bien qu'aucun consensus ne soit établi sur les mécanismes physiques à l'origine du durcissement, les différentes stratégies menées ont permis une meilleure compréhension de ces mécanismes et de leur interaction. Finalement, bien que plusieurs stratégies conduisent à une représentation correcte des courbes expérimentales, le modèle de « **la somme des racines** » en présence de l'effet d'avalanche est proposé car il permet d'une part de bien représenter les courbes expérimentales et d'autre part d'intégrer des mécanismes physiques observés aux échelles inférieures de modélisation. Ce modèle reste cependant encore à améliorer : une apparition différée de la striction et un sur-écrouissage sont actuellement observés sur un calcul de poutre polycristalline. Les différentes conditions aux limites utilisées et les mécanismes adoucissants qui favorisent la localisation de la déformation sont des causes principales provoquant l'écart observé entre les courbes de traction obtenues par les calculs de poutres et par l'identification.

A partir des paramètres identifiés, une étude de convergence a été effectuée pour les matériaux non-irradié et irradié. Elle met en évidence qu'un maillage d'agrégat polycristallin simplifié contenant 343 (7x7x7) grains cubiques avec 27 (3x3x3) éléments finis par grain est nécessaire pour représenter le comportement du VER. Il est mis en évidence que l'augmentation du nombre d'éléments par grain favorise la localisation de la déformation à l'intérieur d'un grain.

Afin d'étudier l'effet de la porosité sur les propriétés mécaniques des matériaux irradiés, un modèle monocristallin poreux de type Gurson a été développé. Cette proposition d'un critère de plasticité pour un monocristal poreux est basée sur l'approche variationnelle de type Hashin-Shtrikman d'un monocristal linéaire de comparaison [Debotton (1995) et Bugat (2000)]. Un terme quadratique de la cission résolue  $\tau^s$  permettant de décrire l'anisotropie liée à la cristallographie intervient dans le critère de plasticité proposé. Trois coefficients  $\alpha$ ,  $q_1$  et  $q_2$  sont introduits dans le critère et ajustés sur un grand nombre des calculs numériques réalisés sur une cellule monocristalline tri-dimensionnelle parfaitement plastique contenant une cavité sphérique. Le modèle proposé peut

parfaitement reproduire les effets de l'orientation cristallographique, de la triaxialité et de la porosité sur la surface de charge d'un monocristal poreux. Ce travail a fait l'objet d'un article qui a été soumis à « International Journal of Solids and Structures ».

Le modèle monocristallin poreux adapté au formalisme en grandes transformations a été implémenté avec les méthodes d'intégration explicite et implicite dans le code ZéBuLoN. Une expression de la porosité est proposée explicitement pour décrire la croissance des cavités.

## Perspectives

L'application des outils développés à la prédiction quantitative de l'effet de fragilisation par le gonflement sur les propriétés mécaniques des aciers inoxydables irradiés nécessite de continuer ce travail. A court terme, les actions suivantes pourront être menées :

- Compléter le modèle monocristallin en intégrant d'autres effets d'irradiation (*e.g.* effet des cavités sur le durcissement d'un matériau fortement irradié) ;
- Identifier certains paramètres du modèle dans le code E.F. ZéBuLoN, sur un maillage plus représentatif d'un VER, par exemple sur un agrégat polycristallin avec des tétraèdres de Voronoï ou avec une microstructure réelle identifiée à partir de tomographie 3D. L'utilisation de ces maillages, bien que coûteux numériquement, permettra de mieux prendre en compte les effets de la localisation de la déformation observée dans les aciers austénitiques inoxydables irradiés. De plus, il est intéressant de reproduire un calcul d'agrégat polycristallin avec le même maillage (même type d'élément, mêmes formes de grains, même nombre de grains et même nombre d'éléments dans un grain) dans le code Cast3M, afin de comparer les résultats obtenus entre les deux codes de calcul ;
- Réaliser des calculs de structures avec la géométrie d'une vraie éprouvette de traction comme celle utilisée pour les essais mécaniques, afin d'étudier l'effet de structure sur le comportement mécanique, surtout pour un matériau fortement irradié ;
- Améliorer le modèle monocristallin poreux développé, avec prise en compte des effets d'écrouissage et l'évolution de la forme de cavités, y compris les phases de croissance ainsi que de coalescence de cavités. Cette amélioration pourra être basée sur des résultats obtenus à partir des calculs de cellule monocristalline poreuse selon la démarche menée dans cette étude ;
- Appliquer le modèle monocristallin poreux développé pour évaluer l'effet du gonflement sur les propriétés mécaniques des matériaux irradiés : la plasticité par une étude sur les éprouvettes de traction et la ténacité par une étude sur les éprouvettes CT ;
- Confronter notre modèle monocristallin dense à des données expérimentales obtenues sur des monocristaux sollicités en température.

A moyen terme, plusieurs voies peuvent être poursuivies :

- Enrichir le développement du modèle monocristallin dense notamment pour y intégrer l'effet du fluage d'irradiation (et donc l'évolution de la microstructure) et d'évaluer son effet sur la réponse du matériau dense et du matériau poreux. Notre modèle actuel permet de traiter la réponse à une sollicitation rapide (quelques secondes), il s'agira donc pour la suite, et pour une application différente, de proposer un modèle permettant d'évaluer l'évolution des champs mécaniques sur des temps beaucoup plus longs. La confrontation à des données expérimentales à différentes échelles apparaît comme une étape importante de ce travail ;
- Etudier le comportement d'une fissure et de sa propagation dans le monocristal poreux sous irradiation ;
- Poursuivre le développement du modèle monocristallin poreux en y intégrant un effet de taille des cavités. Cette étape nécessitera le développement d'un modèle de plasticité à gradient à l'échelle du monocristal. Par ailleurs, l'application du modèle monocristallin poreux développé étant plus large que celle des Internes de cuve, il apparaît intéressant pour d'autres type d'aciers d'y intégrer. Cette évolution pourra être basée sur des calculs de cellule monocristalline poreuse selon la démarche menée dans notre étude.

# Bibliographie

- Adda, Y., Dupouy, J.M., Philibert, J., Quéré, Y., 1991. *Eléments de Métallurgie Physique, Déformation Plastique*. ed. INSTN-CEA Collection Enseignement.
- Alamo, A., Horsten, A., Averty, X., Materna-Morris, E.I., Rieth, M., Brachet, J.C., 2000. Mechanical behavior of reduced activation and conventional martensitic steels after neutron irradiation in the range 250-450°C. *Proc. Of the 9th Int. Conf. On Fusion Reactor Materials ICFRM 9, Colorado Spring, USA, et publié dans JNM 283-287, Page 353, Oct 11-15, 1999.*
- Allen, T.R., Cole, J.I., Trybus, C.L., Porter, D.L., 2000. The effects of long-time irradiation and thermal aging on 304 stainless steel. *J. Nucl. Mat.* 282, 171-179.
- Allen, T.R., Cole, J.I., Tsai, H., Ukai, S., Mizuta, S., Yoshitake, T., 1999. 9th International Conference on Environmental Degradation of Materials in Nuclear Power Systems – Water Reactors, Newport Beach, California, August 1-5, 1999.
- Anand, L., Kothari, M., 1996. A computational procedure for rate-independent crystal plasticity. *J. Mech. Phys. Solids* 44, 525-588.
- Ashby, M.F., 1970. The deformation of plastically non-homogenous materials. *Phil. Mag.* 21, 399-424.
- Averty, X., Brachet, J.C., Pizzanelli, J.P., Castaing, A., 1998. Tensile properties of austenitic, martensitic, and ferritic steels irradiated at 325°C up to 3.4 dpa in Osiris. *Actes du Colloque International FONTEVRAUD IV, 14-18 Septembre, 1998 (références internes de la publication DMT ET DECM : SEMI/LECM/PU/98/033/A et NT SRMA/98/2275).*
- Averty, X., Brachet, J.C., Pizzanelli, J.P., Rozenblum, F., Bertin, J.L., 1999. Irradiation expérimentale «ALEXANDRE» dans Osiris et caractérisations post-irradiatoires associées : une action multi-projets, multi-matériaux et multi-techniques. *Rapport CEA R 5889, Pages 57-67.*
- Azam, N., Le Naour, L., Delaplace, J., 1973. Évolution de la densité de dislocations dans des aciers austénitiques du type 316 L irradiés par des ions Ni<sup>+</sup> de moyenne énergie. *J. Nucl. Mat.* 49, 197-208.
- Bagley, K., Little, E., Lévy, V., Alamo, A., Ehrlich, K., Anderko, K., Calzabini, A., 1987. *Materials for Nuclear Reactor Core Applications*. British Nuclear Energy Society, Volume 2 (BNES, London, 1988), Pages 37-46.
- Bailat C., 1999. The effect of light water reactor (LWR) irradiation conditions on the microstructure and tensile properties of stainless steel. *Rapport de thèse de l'Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, N°2011.*
- Bailat, C., Almazouzi, A., Baluc, N., Schäublin, R., Gröschel, F., Victoria, M., 2000. The effects of irradiation and testing temperature on tensile behaviour of stainless steels. *J. Nucl. Mat.* 283-287, 446-450.
- Bassani, J.L., Wu, T.Y., 1991. Latent hardening in single crystals, II. Analytical characterization and predictions. *Proc. R. Soc. Lond. A* 435, 21-41.



- Belytschko, T., Liu, W.K., Moran, B., 2001. Nonlinear finite elements for continua and structures. Ed. J. Wiley & Sons, Pages 229-233.
- Besson, J., Cailletaud, G., Chaboche, J.L., Forest, S., 2001. Mécanique non linéaire des matériaux. Etudes en Mécanique des Matériaux et des Structures. Hermes Science Publications, Pages 323-327.
- Besson, J., Foerch, R., 1998. Object-oriented programming applied to the finite element method. Part I : General concepts. *Revue Européenne des E. F.* 7, 535-566.
- Besson, J., Le Riche, R., Foerch, R., Cailletaud, G., 1998. Object-oriented programming applied to the finite element method. Part II : Application to material behaviors. *Revue Européenne des E. F.* 7, 567-588.
- Blewitt, T.H., Coltman, R.R., Jamison, R.E., Redman, J.K., 1960. Radiation Hardening of Copper Single Crystals. *J. Nucl. Mat.* 2, 277.
- Bornert, M., Bretheau, T., Gilormini, P., 2011. Homogénéisation en mécanique des matériaux 1 : Matériaux aléatoires élastiques et milieux périodiques. Mécanique et Ingénierie des Matériaux, Hermes Science Publications, Pages 236-238.
- Boulanger, L., Soisson, F., Serruys, Y., 1996. Interaction between the deformation and the irradiation defect clusters in austenitic steels. *J. Nucl. Mat.* 233-237, 1004-1008.
- Brachet, J.C., Averty, X., Lamagnere, P., Alamo, A., rozenblum, F., Raquet, O., Bertin, J.L., 2001. Behavior of different austenitic stainless steels, conventional, reduced activation (RA) and ODS chromium rich ferritic martensitic steels under neutron irradiation at 325°C in PWR environment. ASTM, STP 1405, West Conshohocken, Pages 500-520.
- Brager, H.R., Garner, F.A., 1983. Stability of the radiation-induced  $\gamma'$  phase in 316 stainless steel, *J. Nucl. Mat.* 116, 267-271.
- Brager, H. R., Blackburn, L., Greenslade, D., 1984. The dependence on displacement rate of radiation induced changes in microstructure and tensile properties of AISI 304 and 316. *J. Nucl. Mat.* 122, 332-337.
- Bruemmer, S.M., 1997. Characterization on neutron-irradiated 300-series stainless steels to assess mechanisms for irradiation-assisted stress corrosion cracking. CIR Program Progress Report WO-4068-20, (Diffusion restreinte).
- Bruemmer, S.M., Simonen, E.P., Scott, P.M., Andresen, P.L., Was, G.S., Nelson, J.L., 1999. Radiation-induced material changes and susceptibility to intergranular failure of light-water-reactor core internals. *J. Nucl. Mat.* 274, 299-314.
- Bunge, H.J., 1965. *Z. Metallkd.* 56, 872-874.
- Bunge, H.J., 1982. *Texture analysis in materials science: mathematical methods.* Butterworths, London.
- Byrne, S. T., Wilson, I., Shogan, R., 2002. Microstructural characterization of baffle bolts, Symposium Fontevraud V, Contribution des expertises sur matériaux à la résolution des problèmes rencontrés dans les réacteurs à eau pressurisée, ed. Société Française d'Énergie Nucléaire, Paris, Vol. 1, Pages 343, September 23-27, 2002.

- Byun, T.S., Farrell, K., Lee, E.H., Hunn, J.D., Mansur, L.K., 2001. Strain hardening and plastic instability properties of austenitic stainless steels after proton and neutron irradiation. *J. Nucl. Mat.* 298, 269–279.
- Byun, T., Hashimoto, N., Farrell, K., 2004. Temperature dependence of strain hardening and plastic instability behaviors in austenitic stainless steels. *Acta Mater.* 52, 3889–3899.
- Byun, T.S., Hashimoto, N., Farrell, K., 2006. Deformation mode map of irradiated 316 stainless steel in true stress–dose space. *J. Nucl. Mat.* 351, 303–315.
- Cailletaud, G., 1987. Une approche micromécanique phénoménologique du comportement inélastique des métaux. Rapport de thèse de l'Université Pierre et Marie Curie - Paris VI.
- Cailletaud, G., 1988. Une approche micromécanique du comportement des polycristaux. *Revue Phys. Appl.* 23, 353–365.
- Cailletaud, G., 1992. A micromechanical approach to inelastic behaviour of metals. *Int. J. Plast.* 8, 55–73.
- Cheong, K.-S., Busso, E. P., 2004. Discrete dislocation density modelling of single phase FCC polycrystal aggregates. *Acta Mater.* 52, 5665-5675.
- Cissé, S., 2012. Influence de la localisation de la déformation plastique sur la Corrosion Sous Contrainte des aciers austénitiques inoxydables. Application à l'IASCC des internes de cuve. Rapport de thèse de l'Institut National Polytechnique de Toulouse.
- Cole, J.I., Bruemmer, S.M., 1995. Post-irradiation deformation characteristics of heavy-ion irradiated 304L SS. *J. Nucl. Mat.* 225, 53–58.
- Devincre, B., Hoc, T., Kubin, L.P., 2008. Dislocation mean free paths and strain hardening of crystals, *Science* 320, 1745-1748.
- Devincre, B., Kubin, L.P., Hoc, T., 2006. Physical analyses of crystal plasticity by DD simulations. *Scripta Mat.* 54, 741–746.
- Devincre, B., Pontikis, V., Brechet, Y., Canova, G., Condat, M., Kubin, L.P., 1992. Three-dimensional Simulations of Plastic Flow in Crystals, Plenum Press: New York, M. Marechal, B.L. Holian (eds.), Pages 413.
- de Almeida, L.H., Le May, I., Emygdio, P.R.O., 1998. Mechanistic modeling of dynamic strain aging in austenitic stainless steels. *Materials Characterization*, 41, 137-150.
- de Vries, M.I., 1990. In “Progress report 1989 on fusion technology tasks”. Report ECN-C-90-041, Petten, Netherlands: Energieonderzoek Centrum Nederland.
- Dubuisson, P., 2011. Le gonflement des aciers austénitiques. *Revue de Métallurgie* 108, 33-37.
- Dumoulin, S., 2001. De l'utilisation d'une loi monocristalline en vue de la caractérisation du comportement plastique du multicristal d'aluminium. Rapport de thèse de l'Université de Savoie.

- Edwards, D.J., Garner, F.A., Bruemmer, S.M., Efsing, P., 2009. Nano-cavities observed in a 316SS PWR flux thimble tube, *J. Nucl. Mat.* 384, 249–255.
- Edwards, D.J., Simonen, E.P., Bruemmer, S.M., 2003a. Evolution of fine-scale defects in stainless steels neutron-irradiated at 275°C. *J. Nucl. Mat.* 317, 13–31.
- Edwards, D.J., Simonen, E.P., Garner, F.A., Greenwood, L.R., Oliver, B.M., Bruemmer, S.M., 2003b. Influence of irradiation temperature and dose gradients on the microstructural evolution in neutron-irradiated 316SS. *J. Nucl. Mat.* 317, 32–45.
- Edwards, D.J., Singh, B.N., Bilde-Sørensen, J.B., 2005. Initiation and propagation of cleared channels in neutron-irradiated pure copper and a precipitation hardened CuCrZr alloy. *J. Nucl. Mat.* 342, 164–178.
- Ehrnstén, U., Ivanchenko, M., Nevdacha, V., Yagodzinsky, Y., Toivonen, A., Hänninen, H., 2005. Dynamic strain ageing and EAC of deformed nitrogen-alloyed AISI 316 stainless steels. Proceedings of the 12th International Conference on Environmental Degradation of Materials in Nuclear Power System – Water Reactors, Salt Lake City, Utah, 14-18 August, 2005.
- Ernestová, M., Hojná, A., Keilová, E., Kočík, J., Michalička, J., 2010. Results on irradiated austenitic stainless steel bolts of reactor core internals. Symposium Fontevraud 7 - Contribution of Materials Investigations to Improve the Safety and Performance of LWRs, Paper Reference n° A053-T02, Avignon, September 26-30.
- Erwin, W.E., Kerr, J.G., 1982. WRC Bulletin 275, New York.
- Essman, U., Mughrabi, H., 1979. Annihilation of dislocations during tensile and cyclic deformations and limits of dislocation densities. *Phil. Mag. A* 40, 731.
- Estrin, Y., 1996. Dislocation-density-related constitutive modeling. Unified constitutive laws of plastic deformation, Academic Press, Pages 69-106.
- Etienne, A., Radiguet, B., Pareige, P., Massoud, J.-P., Pokor, C., 2008. Tomographic atom probe characterization of the microstructure of a cold worked 316 austenitic stainless steel after neutron irradiation. *J. Nucl. Mat.* 382, 64-69.
- Feaugas, X., 1999. On the origin of the tensile flow stress in the stainless steel AISI 316L at 300K: back stress and effective stress. *Acta Mater.* 47, 3617-3632.
- Fish, R., Hunter, C., 1976. Tensile properties of fast reactor irradiated type 304 stainless steel. ASTM STP 611, Pages 119–138.
- Fivel, M., 1997. Etudes numériques à différentes échelles de la déformation plastique des monocristaux de structures CFC. Rapport de thèse de l'Institut National Polytechnique de Grenoble.
- Fivel, M., Forest, S., 2004. Plasticité cristalline et transition d'échelle : cas du monocristal. *Techniques de l'Ingénieur*, M4016, 23 pages.
- Forest, S., 1998. Modeling slip, kink and shear banding in classical and generalized single crystal plasticity. *Acta Mater.* 46, 3265-3281.

- Foster, J.P., Porter, D.L., Harrod, D.L., Mager, T.R., Burke, M.G., 1995. 316 stainless steel cavity swelling in a PWR. *J. Nucl. Mat.* 224, 207-215.
- Franciosi, P., 1984. Etude théorique et expérimentale du comportement élastoplastique des monocristaux métalliques se déformant par glissement : modélisation pour un chargement complexe quasi statique. Rapport de thèse de l'Université Paris Nord - Paris XIII.
- Franciosi, P., 1985. The concepts of latent hardening and strain hardening in metallic single crystals. *Acta Metall.* 33, 1601–1612.
- Franciosi, P., Berveiller, M., Zaoui, A., 1980. Latent hardening in copper and aluminium single crystals. *Acta Metall.* 28, 273–283.
- Friedel, J., 1964. *Dislocations*, Pergamon Press.
- Fujimoto, K., Yonezawa, T., Wachi, E., Yamaguchi, Y., Nakano, M., Shogan, R.P., Massoud, J.P., Mager, T.R., 2005. Proceedings of 12th International Conference on Environmental Degradation of Materials in Nuclear Power System – Water Reactors, Salt Lake City, Utah, Pages 299, August 14–18, 2005.
- Gan, J., 1999. Microstructure evolution in proton-irradiated austenitic Fe-Cr-Ni alloys under LWR core conditions. PhD manuscript of The University of Michigan.
- Garner, F.A., 1994. *Materials Science and Technology*, Chap. 6, Vol. 10A. VCH, New York, Page 419.
- Garner, F. A., Greenwood, L.R., 2003. Survey of recent developments concerning the understanding of radiation effects on stainless steels used in the LWR power industry, 11th International Conference on Environmental Degradation of Materials in Nuclear Power Systems – Water Reactors, Skamania Lodge, American Nuclear Society, Pages 887-909, August 5-9, 2003.
- Garner, F. A., Greenwood, L.R., Harrod, D.L., 1993. Potential high fluence response of pressure vessel internals constructed from austenitic stainless steels. 6th International Conference on Environmental Degradation of Materials in Nuclear Power Systems – Water Reactors, San Diego, National Association of Corrosion Engineers, August 1-5, 1993.
- Garner, F.A., Hamilton, M.L., Panayotou, N.F., Johnson, G.D., 1981. The microstructural origins of yield strength changes in AISI 316 during fission or fusion irradiation. *J. Nucl. Mat.* 103-104, 803–807.
- Garner, F.A., Oliver, B.M., Greenwood, L.R., Edwards, D.J., Bruemmer, S.M., Grossbeck, M.L., 2001. Generation and retention of helium and hydrogen in austenitic steels irradiated in a variety of LWR and test reactor spectral environments. 10th International Conference on Environmental Degradation of Materials in Nuclear Power Systems – Water Reactors, Lake Tahoe, in CD Format, August 5-9, 2001.
- Garner, F.A., Simonen, E.P., Oliver, B.M., Greenwood, L.R., Grossbeck, M.L., Wolfer, W.G., Scott, P.M., 2006. Retention of hydrogen in fcc metals irradiated at temperatures leading to high densities of bubbles or voids. *J. Nucl. Mat.* 356, 122–135.
- Garner, F.A., Wolfer, W.G., 1982. Effects of Radiation on Materials: 11<sup>th</sup> Conference, ASTM STP 782. American Society for Testing and Materials, West Conshohocken, PA, Page 1073.

- Garnier, J., 2007. Déformation sous flux des aciers austénitiques des structures internes des réacteurs à eau pressurisée. Rapport de thèse de l'Institut National Polytechnique de Grenoble.
- Goldstein, H., Poole, C., Safko, J., 2002. Classical mechanics. Third Edition. Addison Wesley.
- Goltrant, O., Cauvin, R., Deydier, D., Trenty, A., 1998. Eléments internes inférieurs: apports de l'expertise d'une cornière de CHOOZ A, Symposium Fontevraud IV, Contribution des expertises sur matériaux à la résolution des problèmes rencontrés dans les réacteurs à eau pressurisée. Paris, Société Française d'Énergie Nucléaire, Vol. 2, 183.
- Hamilton, M.L., Canon, N.S., Jonshon, G.D., 1982. Mechanical properties of highly irradiated 20% cold worked type 316 stainless steel. Effect of radiation on materials: 11th Eleventh conference ASTM STP 782, Pages 636-647.
- Hamilton, M.L., Huang, F.-H., Yang, W.J.S., Garner, F.A., 1987. Influence of Radiation in Material Properties: 13th International Symposium (Part II), ASTM STP 956, Pages 245-270.
- Han, X., 2010. Modélisation de la fragilisation due au gonflement dans les aciers inoxydables austénitiques irradié - Rapport d'avancement de la première année de thèse. Rapport interne du CEA.
- Hashimoto, N., Zinkle, S.J., Rowcliffe, A.F., Robertson, J.P., Jitsukawa, S., 2000. Deformation mechanisms in 316 stainless steel irradiated at 60°C and 330°C. J. Nucl. Mat. 283-287, 528-534.
- Hashimoto, N., Byun, T.S., Farrell, K., 2006. Microstructural analysis of deformation in neutron-irradiated fcc materials. J. Nucl. Mat. 351, 295-302.
- Hashimoto, N., Zinkle, S.J., Rowcliffe, A.F., Robertson, J.P., Jitsukawa, S., 2000. Deformation mechanisms in 316 stainless steel irradiated at 60°C and 330°C. J. Nucl. Mat. 283-287, 528-534.
- Hill, R., 1965. Continuum micro-mechanics of elastoplastic polycrystals. J. Mech. Phys. Solids 13, 89-101.
- Hill, R., 1966. Generalized constitutive relations for incremental deformation of metal crystals by multislip. J. Mech. Phys. Solids 14, 95-102.
- Hirth, J.P., 1960. On dislocation interactions in the FCC lattice. J. Appl. Phys. 32, 700-706.
- Hoc, T., Forest, S., 2001. Polycrystal modelling of IF-Ti steel under complex loading path. Int. J. Plast. 17, 65-85.
- Hoc, T., Rey, C., Raphanel, J.L., 2001. Experimental and numerical analysis of localization during sequential test for an IF-Ti steel. Acta Mater. 49, 1835-1846.
- Holmes, J., Straalsund, J., 1977. Effects of fast reactor exposure on the mechanical properties of stainless steels. International Conference on Radiation Effects in Breeder Reactor Structural Materials, Scottsdale, Pages 53-63, June 19-23, 1977.
- Huang, J., Ghoniem, N.M., 2002. The dynamics of dislocation interaction with sessile self-interstitial atom (SIA) defect cluster atmospheres. Comp. Mater. Sci. 23, 225-234.
- Huntington, H.B., 1958. The elastic constants of crystals. Solid State Physics, by Academic Press Incorporation Publishers 7, 214-351.

- Jackson, P.J., Basinski, Z.S., 1976. Latent hardening and the flow stress in copper single crystals. *Can. J. Phys.* 45, 707.
- Jacobs, A.J., 1987. Hydrogen buildup in irradiated Type-304 stainless steel. Influence of Radiation on Material Properties: 13th International Symposium (Part II), ASTM STP 956, Pages 239.
- Jitsukawa, S., Ioka, I., Hishinuma, A., 1999. Post-irradiation mechanical properties of austenitic alloys at temperatures below 703 K, *J. Nucl. Mat.* 271-272, 167-172.
- Johnston, W.G., Lauritzen, T., Rosolowski, J.H., Turkalo, A.M., 1976. Physical Chemistry Laboratory of General Electric, Report No. 76CRD019.
- Kalidindi, S.R., Bronkhorst, C.A., Anand, L., 1992. Crystallographic texture evolution in bulk deformation processing of fcc metals. *J. Mech. Phys. Solids* 40, 537-569.
- Karaman, I., Sehitoglu, H., Maier, H.J., Chumlyakov, Y.I., 2001. Competing mechanisms and modeling of deformation in austenitic stainless steel single crystals with and without nitrogen. *Acta Mater.* 49, 3919-3933.
- Kashyap, B., McTaggart, K., Tangri, K., 1988. Study on the substructure evolution and flow behavior in type 316L stainless steel over the temperature range 21-900°C. *Phil. Mag. A* 57, 97-114.
- Kelly, A., Nicholson, R.B., 1971. Strengthening methods in crystals. Applied Science Publishers Ltd., pages 12-37.
- Krishna, S., De, S., 2011. Dislocation and defect density-based micromechanical modeling of the mechanical behavior of FCC metals under neutron irradiation. *Mech. Mat.* 43, 99-110.
- Krishna, S., Zamiri, A., De, S., 2010. A temperature and rate-dependent micromechanical model of molybdenum under neutron irradiation. *Phil. Mag.* 90, 4013-4025.
- Kröner, E., 1986. Modelling small deformations of polycrystals. Elsevier Applied Science Publishers 8, 229-291.
- Kubin, L.P., Canova, G.R., 1992. The modelling of dislocation patterns, *Scripta Metall.* 27, 957-962.
- Kubin, L.P., Devincre, B., Hoc, T., 2008. Modeling dislocation storage rates and mean free paths in face-centered cubic crystals. *Acta Mater.* 56, 6040-6049.
- Lee, E.H., Byun, T.S., Hunn, J.D., Farrell, K., Mansur, L.K., 2001a. Origin of hardening and deformation mechanisms in irradiated 316 LN austenitic stainless steel. *J. Nucl. Mat.* 296, 183-191.
- Lee, E.H., Byun, T.S., Hunn, J.D., Yoo, M.H., Farrell, K., Mansur, L.K., 2001b. On the origin of deformation microstructures in austenitic stainless steels : Part I-microstructures. *Acta Mater.* 49, 3269-3276.
- Lee, E.H., Byun, T.S., Hunn, J.D., Yoo, M.H., Farrell, K., Mansur, L.K., 2001c. On the origin of deformation microstructures in austenitic stainless steels : Part II-mechanisms. *Acta Mater.* 49, 3277-3287.
- Lemaignan, C., 2004. Science des matériaux pour le nucléaire. Ed. EDP Sciences. Page 36.

- Ling, X., Horstemeyer, M.F., Potirniche, G. P., 2005. On the numerical implementation of 3D rate-dependent single crystal plasticity formulations. *Int. J. Numer. Meth. Eng.* 63, 548–568.
- Liu, J., Suazay, M., Robertson, C., 2011. Cyclic behavior of 316L steel predicted by means of finite element computations. 11th International Conference on the Mechanical Behavior of Materials (ICM11). *Procedia Engineering* 10, 2502–2507.
- Lucas, G.E., 1993. The evolution of mechanical property change in irradiated austenitic stainless steels. *J. Nucl. Mat.* 206, 287-305.
- Lucas, G.E., Billone, M., Pawel, J.E., Hamilton, M. L., 1996. Implications of radiation-induced reductions in ductility to the design of austenitic stainless steel structures. *J. Nucl. Mat.* 233-237, 207-212.
- Madec, R., 2001. Des intersections entre dislocations à la plasticité du monocristal CFC ; Etude par dynamique des dislocations. Rapport de thèse de l'Université Paris Sud - Paris XI – Orsay.
- Madec, R., Devincré, B., Kubin, L.P., Hoc, T., Rodney, D., 2003. The role of collinear interaction in dislocation-induced hardening. *Science* 301, 1879–1882.
- Makin, M.J., 1964. The long-range forces between dislocation loops and dislocations. *Phil. Mag.* 10, 695-711.
- Mandel, J., 1965. Une généralisation de la théorie de la plasticité de W. T. Koiter. *Int. J. Solids Struct.* 48, 273–295.
- Mandel, J., 1973. Équations constitutives et directeurs dans les milieux plastiques et viscoplastiques. *Int. J. Solids Struct.* 9, 725-740.
- Marquardt, D.W., 1963. An Algorithm for the Estimation of Nonlinear Parameters. *Soc. Ind. Appl. Maths. J.* 11, 431-441.
- Massoud, J.-P., 2005. Durée de vie des internes irradiés de cuve. Dossier de synthèse : Matériaux irradiés. Note Technique interne EDF, référence HT-27/04/045/A.
- Maziasz, P.J., Mc Hargue, C.J., 1987. Microstructural evolution in annealed austenitic steels during neutron irradiation. *Int. Mat. Reviews* 32, 190-219.
- Maziasz, P.J., 1992. Temperature dependence of the dislocation microstructure of PCA austenitic stainless steel irradiated in ORR spectrally-tailored experiment, *J. Nucl. Mat.* 191-194, 701-705.
- Maziasz, P.J., 1993. Overview of microstructural evolution in neutron irradiated austenitic stainless steels. *J. Nucl. Mat.* 205, 118-145.
- Mecking, H., Lucke, K., 1970. A new aspect of the theory of flow and stress in metals. *Scripta Metall.* 4, 427-432.
- Mecking, H., Kocks, U.F., 1981. Kinetics of flow and strain hardening. *Acta Metall.* 29, 1865-1875.
- Méric, L., Cailletaud, G., 1991. Single crystal modelling for structural calculations: Part 2. F.E. implementation. *J. Eng. Mat. Tech.* 113, 171–182.

- Monnet, G., 2009. A crystalline plasticity law for austenitic stainless steels. Material Ageing Institute, Communication personnelle.
- Monnet, G., 2012. Communication personnelle, calculs DDD obtenus dans le cadre du projet Perform-60.
- Miyaoto, H., Funami, K., Uchara, M., 1977. Latent hardening in aluminium single crystals. J. Fac. Eng. Univ. Tokyo (B) 24, 349.
- Mughrabi, H., 2001. On the role of strain gradients and long-range internal stresses in deformed metal crystals. Mat. Sci. Eng. A 317, 171-180.
- Mughrabi, H., Cahn, R.W., Haasen, P., Kramer, E.J., 1993. Plastic deformation and fracture of materials. Materials Science and Technology: A comprehensive treatment, Vol. 6, Page 37.
- Neustroev, V.S., Garner, F.A., 2008. Very high swelling and embrittlement observed in a Fe-18Cr-10Ni-Ti hexagonal fuel wrapper irradiated in the BOR-60 fast reactor. J. Nucl. Mat. 378, 327-332.
- Nguyen, C.N., 2010. Modélisation du comportement en plasticité et à rupture des aciers bainitiques irradiés. Rapport de thèse de l'Ecole des Mines ParisTech.
- Nogaret, T., 2007. Approche multiéchelle des mécanismes de plasticité dans les aciers austénitiques irradiés. Rapport de thèse de l'Institut National Polytechnique de Grenoble.
- Odette, G.R., Lucas, G.E., 1989. Effects of low temperature neutron irradiation on the properties of 300 series stainless steels. Fusion reactor materials semi-annual progress report for the period ending March 31, 1989, DOE/ER-0313/6, Pages 313-335.
- Onimus, F., 2003. Approche expérimentale et modélisation micromécanique du comportement des alliages de zirconium irradiés. Rapport de thèse de l'Ecole Centrale de Paris.
- Osetsky, Y.N., Bacon, D.J., Serra, A., Singh, B.N., Golubov, S.I., 2000. Stability and mobility of defect clusters and dislocation loops in metals. J. Nucl. Mat. 276, 65-77.
- Osetsky, Y.N., Rodney, D., Bacon, D.J., 2006. Atomic-scale study of dislocation-stacking fault tetrahedron interactions. Part I: mechanisms. Phil. Mag. 86, 2295-2313.
- Pedraza, D.F., Maziasz, P.J., 1987. Radiation-induced changes in microstructure: International Symposium (Part 1), ASTM-STP 955, Pages 161-194.
- PERFORM60, 2008. Project : Prediction of the effects of radiation for reactor pressure vessel and in-core materials using multi-scale modeling – 60 years foreseen plant lifetime. Annex I – “Description of work”. Seventh Framework Program of Euratom for Nuclear Research and Training Activities. Grant agreement no. : 232612.
- Pokor, C., 2003. Caractérisation microstructurale et modélisation du durcissement des aciers austénitiques irradiés des structures internes des réacteurs à eau pressurisée. Rapport de thèse de l'Institut National Polytechnique de Grenoble, Rapport CEA-R-6031.
- Pokor, C., 2012. Discussion personnelle au Centre des Matériaux de Mines ParisTech le 15 mai 2012.



- Pokor, C., Averty, X., Bréchet, Y., Dubuisson, P., Massoud, J.-P., 2004a. Effect of irradiation defects on the work hardening behavior. *Scripta Mat.* 50, 597-600.
- Pokor, C., Bréchet, Y., Dubuisson, P., Massoud, J.-P., Averty X., 2004b. Irradiation damage in 304 and 316 stainless steels: experimental investigation and modeling. Part II: Irradiation induced hardening. *J. Nucl. Mat.* 326, 30-37.
- Pokor, C., Bréchet, Y., Dubuisson, P., Massoud, J.-P., Barbu, A., 2004c. Irradiation damage in 304 and 316 stainless steels: experimental investigation and modeling. Part I: Evolution of the microstructure. *J. Nucl. Mat.* 326, 19-29.
- Porollo, S.I., Konobeev, Yu.V., Garner, F.A., 2009. Swelling and microstructure of austenitic stainless steel ChS-68 CW after high dose neutron irradiation. *J. Nucl. Mat.* 393, 61-66.
- RCC-M, 1988. Règles de conception et de construction des matériels mécaniques des îlots nucléaires PWR, tome II – matériaux (2ème partie), association française pour les règles de conception et de construction des matériels des chaudières électro-nucléaires.
- Renault, A., Malaplate, J., Pokor, C., Gavaille, P., 2011. TEM and EFTEM characterization of solution annealed 304L stainless steel irradiated in PHENIX, up to 36dpa and at 390°C. *J. Nucl. Mat.* 421, 124-131.
- Renault, A., Malaplate, J., Pokor, C., Gavaille, P., Massoud, J.-P., Garnier, J., 2010. Effects of chemical composition, metallurgical state and stress during irradiation on microstructure of neutron-irradiated austenitic stainless steels: comparison of PWR and BOR-60 irradiations. Symposium Fontevraud 7 - Contribution of Materials Investigations to Improve the Safety and Performance of LWRs, Paper Reference n° A023-T02, Avignon, September 26-30, 2010.
- Renault, A., Pokor, C., Garnier, J., Malaplate, J., 2009. Microstructure and grain boundary chemistry evolution in austenitic stainless steels irradiated in the BOR-60 reactor up to 120 dpa. 14<sup>th</sup> International Conference on Environmental Degradation of Materials in Nuclear Power Systems Water Reactor, Volume 1, Pages 1324-1334, Virginia, 23-27 August, 2009.
- Robach, J.S., 2003. Dislocation-defect interactions in irradiated and quenched fcc metals. Rapport de thèse de l'University of Illinois at Urbana-Champaign.
- Robach, J.S., Robertson, I.M., Arsenlis, A., 2003. In-situ TEM observations and MD simulations of dislocation-defect interactions in ion-irradiated cu. *Phil. Mag.* 83, 955.
- Rodchenkov, B.S., Kalinin, G.M., Strebkov, Y.S., Shamardin, V.K., Prokhorov, V.I., Bulanova, T.M., 2009. Irradiation behavior of Ti-stabilized 316L type steel, *J. Nucl. Mat.* 386-388, 277-280.
- Rodney, D.M.G., 1999. Dislocation pinning by small interstitial loops: a molecular dynamics study. *Phys. Rev. Lett.* 82, 3272-3275.
- Rodney, D., 2000. Dislocations et processus élémentaires de la plasticité dans les métaux cfc : apports des simulations à l'échelle atomique, rapport CEA-R-5906.
- Rodney, D., Martin, G., Bréchet, Y., 2001. Irradiation hardening by interstitial loops: atomistic study and micromechanical model, *Mat. Sci. Eng. A* 309-310, 198-202.

- Rupin, N., Proix, J.-M., Latourte, F., 2011. Implementation of a new constitutive law based on dislocation dynamics for FCC materials. EDF R&D internal report, ref: H-T24-2010-01128-EN.
- Saada, G., 1960. Sur le durcissement dû à la recombinaison des dislocations, *Acta Metall.* 8, 841-847.
- Saai, A., 2007. Modèle physique de la plasticité d'un cristal métallique FCC soumis à des chargements alternés : Contribution à la définition d'une modélisation multiéchelles de la mise en forme des métaux. Rapport de thèse de l'Université de Savoie, tel-00335219.
- Samuel, E.I., Chaudhary, B., Rao, K.B.S., 2002. Influence of temperature and strain rate on tensile work hardening behavior of type 316LN austenitic stainless steel. *Scripta Mat.* 46, 507-512.
- Sauzay, M., 2007. Cubic elasticity and stress distribution at the free surface of polycrystals. *Acta Mater.* 55, 1193–1202.
- Sauzay, M., Bavard, K., Karlsen, W., 2010. TEM observations and finite element modelling of channel deformation in pre-irradiated austenitic stainless steels – Interactions with free surfaces and grain boundaries. *J. Nucl. Mat.* 406, 152-165.
- Sauzay, M., Evrard, P., Steckmeyer, A., Ferrié, E., 2010. Physically-based modeling of the cyclic macroscopic behaviour of metals. *Fatigue 2010. Procedia Engineering* 2, 531-540.
- Schmid, E., Boas, W., 1935. *Kristallplasticizität*. Springer Verlag.
- Sencer, B.H., Was, G.S., Sagisaka, M., Isobe, Y., Bond, G.M., Garner, F.A., 2003. Proton irradiation emulation of PWR neutron damage microstructures in solution annealed 304 and cold-worked 316 stainless steels. *J. Nucl. Mat.* 323, 18-28.
- Shi, L., Northwood, D., 1995. The mechanical behavior of an AISI type 310 stainless steel. *Acta Metall.* 43, 453-460.
- Simonen, E.P., Edwards, D.J., Bruemmer, S.M., 1999. Local evolution of microstructure and microchemistry near grain boundaries in irradiated austenitic stainless steels. *Proceedings of the 9th International Symposium on Environmental Degradation of Nuclear Materials in Nuclear Power Systems-Water Reactors, Newport Beach, California, Pages 1107-1112, August 1-5, 1999.*
- Singh, B.N., Foreman, A.J.E., Trinkaus, H., 1997. Radiation hardening revisited: role of intracascade clustering. *J. Nucl. Mat.* 249, 103-115.
- Strudel, J.L., Washburn, J., 1964. Direct observations of interactions between imperfect loops and moving dislocations in aluminium. *Phil. Mag.* 9, 491-506.
- Tabourot, L., 1992. Loi de comportement élastoviscoplastique du monocristal en grandes transformations. Rapport de thèse de l'Institut National Polytechnique de Grenoble.
- Tabourot, L., Fivel, M., Rauch, E., 1997. Generalised constitutive laws for fcc single crystals. *Mat. Sci. Eng. A* 234–236, 639–642.
- Tang, H.T., 2004. Materials Reliability Program: Development of Material Constitutive Model for Irradiated Austenitic Stainless Steels (MRP-135). EPRI Technical Report-1011127.

- Tanguy, B., Han, X., Besson, J., Forest, S., Robertson, C., Rupin, N., 2012. Dislocations and irradiation defects-based micromechanical modelling for neutron irradiated austenitic stainless steels. Proceeding of International Symposium on Plasticity 2013.
- Teodosiu, C., 1975. A physical theory of the finite elastic-viscoplastic behaviour of single crystals. Eng. Trans. 23, 157-183.
- Thinkaus, H., Singh, B.N., Foreman, A.J.E., 1997a. Mechanisms for decoration of dislocations by small dislocation loops under cascade damage conditions. J. Nucl. Mat. 249, 91-102.
- Thinkaus, H., Singh, B.N., Foreman, A.J.E., 1997b. Segregation of cascade induced interstitial loops at dislocations: possible effect on initiation of plastic deformation. J. Nucl. Mat. 251, 172-187.
- Toloczko, M.B., Gelles, D.S., Garner, F.A., Kurtz, R.J., Abe, K., 2004. Irradiation creep and swelling from 400 to 600°C of the oxide dispersion strengthened ferritic alloy MA957. J. Nucl. Mat. 329-333, 352-355.
- Torimaru, T., Kodama, M., Tanaka, S., Nakamura, T., Kumagai, K., Asano, K., 2010. Fracture Toughness of Austenitic Stainless Steels after BWR Irradiation. Symposium Fontevraud 7 - Contribution of Materials Investigations to Improve the Safety and Performance of LWRs, Paper Reference n° A060-T02, Avignon, September 26-30, 2010.
- Vincent, L., 2009. Implantation numérique d'une loi de comportement cristalline pour matériau CC dans le code de calcul par éléments finis CAST3M. Note technique interne CEA. Référence DEN/DANS/DMN/SRMA/LC2M/NT/2009-3023/B.
- Vincent, L., 2011. Implantation numérique d'une loi de comportement cristalline pour matériau CC dans le code de calcul par éléments finis CAST3M. Note technique interne CEA. Référence DEN/DANS/DMN/SRMA/LC2M/NT/2009-3023/C.
- Victoria, M., Baluc, N., Bailat, C., Dai, Y., Lупpo, M.I., Schäublin, R., Singh, B.N., 2000. The microstructure and associated tensile properties of irradiated fcc and bcc metals. J. Nucl. Mat. 276, 114-122.
- Weber, G., Anand, L., 1990. Finite deformation constitutive equations and a time integration procedure for isotropic, hyperelastic-viscoplastic solids. Compu. Meth. in Appl. Mech. Eng. 79, 173-202.
- Wu, T.Y., Bassani, J.L., Laird, C., 1991. Latent hardening in single crystals, I. Theory and experiments. Proc. R. Soc. Lond. A 435, 1-19.
- Yang, Y., Abe, H., Sekimura, N., 2003. Behavior of Frank-loops under stress environment. Phy. Lett. A 315, 293-300.
- Zhang, C.H., Jang, J., Cho, H.D., Yang, Y.T., 2009. Void swelling in MA956 ODS steel irradiated with 122 MeV Ne-ions at elevated temperatures. Fusion Reactor Materials 386-388, 457-461.
- Zinkle, S.J., Sindelar, R.L., 1988. Defect microstructure in neutron-irradiated copper and stainless steel, J. Nucl. Mat. 155-157, 1196-1200.
- Zinkle, S.J., Maziasz, P.J., Stoller, R.E., 1993. Dose dependence of the microstructural evolution in neutron irradiated austenitic stainless steel. J. Nucl. Mat. 206, 266-286.

Zinkle, S.J., Matsukawa, Y., 2004. Observation and analysis of defect cluster production and interactions with dislocations. *J. Nucl. Mat.* 329-333, 88-96.

# Annexe I : Implémentation numérique du modèle cristallin

## Annexe I. 1 : Notations et formules

Dans une base  $\mathfrak{R}(e_i, e_j, e_k, e_l)$ , en notation de tenseurs et en notation indicielle :

### - Tenseurs d'identité :

Tenseur d'identité d'ordre 2 :  $\underline{\underline{1}} = I_{ij} = \delta_{ij}$

Tenseur d'identité d'ordre 4 :  $\underline{\underline{\underline{1}}} = I_{ijkl} = \frac{1}{2}(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk})$

### - Opérations tensorielles :

$$\underline{\underline{C}} = \underline{\underline{A}} \cdot \underline{\underline{B}} \quad C_{ij} = A_{im} B_{mj}$$

$$C = \underline{\underline{A}} : \underline{\underline{B}} \quad C = A_{ij} B_{ij}$$

$$\underline{\underline{C}} = \underline{\underline{\Lambda}} : \underline{\underline{B}} \quad C_{ij} = \Lambda_{ijkl} B_{kl}$$

$$\underline{\underline{C}} = \underline{\underline{A}} \otimes \underline{\underline{B}} \quad C_{ijkl} = A_{ik} B_{jl}$$

$$\underline{\underline{C}} = \underline{\underline{A}} \otimes \underline{\underline{B}} \quad C_{ijkl} = A_{ij} B_{kl}$$

$$\underline{\underline{C}} = \underline{\underline{A}} \otimes \underline{\underline{B}} \quad C_{ijkl} = A_{il} B_{jk}$$

$$\underline{\underline{A}} \cdot \underline{\underline{B}} = A_{ijkn} B_{nl} = A_{ijmn} \delta_{mk} B_{nl} = A_{ijmn} : (\delta_{mk} B_{nl})_{mkl} = \underline{\underline{A}} : (\underline{\underline{1}} \otimes \underline{\underline{B}})$$

$$\underline{\underline{A}} \cdot \underline{\underline{B}} = A_{in} B_{njkl} = A_{in} \delta_{mk} B_{njkl} = (A_{in} \delta_{mj})_{imnj} : B_{njkl} = (\underline{\underline{A}} \otimes \underline{\underline{1}}) : \underline{\underline{B}}$$

$$(\underline{\underline{A}} \otimes \underline{\underline{B}}) : (\underline{\underline{1}} \otimes \underline{\underline{1}}) = A_{im} B_{jn} \delta_{ml} \delta_{nk} = A_{il} B_{jk} = \underline{\underline{A}} \otimes \underline{\underline{B}}$$

### - Dérivées partielles :

$$\frac{\partial \underline{\underline{A}} \cdot \underline{\underline{B}}}{\partial \underline{\underline{B}}} = \frac{\partial A_{im} B_{mj}}{\partial B_{kl}} = A_{im} \frac{\partial B_{mj}}{\partial B_{kl}} = A_{im} \delta_{mk} \delta_{jl} = A_{ik} \delta_{jl} = \underline{\underline{A}} \otimes \underline{\underline{1}}$$

$$\frac{\partial \underline{\underline{A}} \cdot \underline{\underline{B}}}{\partial \underline{\underline{A}}} = \frac{\partial A_{im} B_{mj}}{\partial A_{kl}} = \frac{\partial A_{im}}{\partial A_{kl}} B_{mj} = \delta_{ik} \delta_{ml} B_{mj} = \delta_{ik} B_{lj} = \delta_{ik} B_{jl}^T = \underline{\underline{1}} \otimes \underline{\underline{B}}^T$$

$$\frac{\partial \underline{\underline{A}} \cdot \underline{\underline{B}} \cdot \underline{\underline{C}}}{\partial \underline{\underline{B}}} = \frac{\partial A_{im} B_{mn} C_{nj}}{\partial B_{kl}} = A_{im} \frac{\partial B_{mn}}{\partial B_{kl}} C_{nj} = A_{im} \delta_{mk} \delta_{nl} C_{nj} = A_{ik} C_{lj} = A_{ik} C_{jl}^T = \underline{\underline{A}} \otimes \underline{\underline{C}}^T$$

$$\frac{\partial \underline{\underline{A}}^{-1}}{\partial \underline{\underline{A}}} = \frac{\partial A_{ij}^{-1}}{\partial A_{kl}} = -A_{ik}^{-1} A_{lj}^{-1} = -A_{ik}^{-1} A_{jl}^{-T} = -\underline{\underline{A}}^{-1} \otimes \underline{\underline{A}}^{-T}$$

$$\frac{\partial \underline{\underline{A}}^T}{\partial \underline{\underline{A}}} = \frac{\partial A_{ij}^T}{\partial A_{kl}} = \frac{\partial A_{ji}}{\partial A_{kl}} = \delta_{jk} \delta_{il} = \delta_{il} \delta_{jk} = \underline{\underline{1}} \otimes \underline{\underline{1}}$$

$$\frac{\partial a(\underline{\underline{A}}) \underline{\underline{B}}}{\partial \underline{\underline{A}}} = \frac{\partial a(\underline{\underline{A}}) B_{ij}}{\partial A_{kl}} = \underline{\underline{B}} \otimes \frac{\partial a(\underline{\underline{A}})}{\partial \underline{\underline{A}}}$$

$$\frac{\partial (\det \underline{\underline{A}})}{\partial \underline{\underline{A}}} = (\det \underline{\underline{A}}) \underline{\underline{A}}^{-T}$$

- En notation de Voigt-Kelvin, on définit :

- un vecteur colonne par  $\{A\}$
- un vecteur ligne par  $\{A\}^T$
- une matrice par  $[A]$

## Annexe I. 2 : Calcul de l'expression de la puissance spécifique des efforts intérieurs

$$P = \frac{1}{\rho} \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{D}} = \frac{1}{\rho} \underline{\underline{\sigma}} : (\underline{\underline{L}}^e + \underline{\underline{E}} \cdot \underline{\underline{L}}^p \cdot \underline{\underline{E}}^{-1}) = \frac{1}{\rho} \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{L}}^e + \frac{1}{\rho} \underline{\underline{\sigma}} : (\underline{\underline{E}} \cdot \underline{\underline{L}}^p \cdot \underline{\underline{E}}^{-1})$$

$$\Rightarrow P = \frac{1}{\rho_0} (\underline{\underline{E}} \cdot \underline{\underline{\Pi}}^e \cdot \underline{\underline{E}}^T) : (\underline{\underline{\dot{E}}} \cdot \underline{\underline{E}}^{-1}) + \frac{1}{\rho_0} (\underline{\underline{E}} \cdot \underline{\underline{\Pi}}^e \cdot \underline{\underline{E}}^T) : (\underline{\underline{E}} \cdot \underline{\underline{\dot{P}}} \cdot \underline{\underline{P}}^{-1} \cdot \underline{\underline{E}}^{-1})$$

$$\Rightarrow P = \frac{1}{\rho_0} E_{ik} \Pi_{kl}^e E_{jl} \dot{E}_{im} E_{mj}^{-1} + \frac{1}{\rho_0} E_{ik} \Pi_{kl}^e E_{jl} \dot{P}_{mn} P_{np}^{-1} E_{pj}^{-1}$$

$$\Rightarrow P = \frac{1}{\rho_0} \Pi_{kl}^e E_{ik} \dot{E}_{il} + \frac{1}{\rho_0} E_{ik} \Pi_{kl}^e E_{im} \dot{P}_{mn} P_{nl}^{-1}$$

$$\Rightarrow P = \frac{1}{\rho_i} \underline{\underline{\Pi}}^e : \underline{\underline{\dot{E}}}_{GL} + \frac{1}{\rho_i} (\underline{\underline{E}}^T \cdot \underline{\underline{E}} \cdot \underline{\underline{\Pi}}^e) : (\underline{\underline{\dot{P}}} \cdot \underline{\underline{P}}^{-1})$$

On obtient donc :

$$P = \frac{1}{\rho_i} \underline{\underline{\Pi}}^e : \underline{\underline{\dot{E}}}_{GL}^e + \frac{1}{\rho_i} \underline{\underline{M}} : \underline{\underline{L}}^p$$

### Annexe I. 3 : Calcul des dérivées partielles des résidus dans le code de calcul ZéBuLoN

Ici, on présente le calcul des dérivées partielles de l'ensemble des variables internes utilisées pour la méthode d'intégration implicite de Newton dans ZéBuLoN :  $\underline{\underline{E}}$ ,  $\gamma^s$ ,  $r_D^s$  et  $r_L^p$ .

#### ❖ Dérivées partielles de $R_{\underline{\underline{E}}}$

$$R_{\underline{\underline{E}}} = \Delta \underline{\underline{E}} - \Delta \underline{\underline{F}} \cdot \underline{\underline{F}}^{-1} \underline{\underline{E}} + \underline{\underline{E}} \cdot \left( \sum_s \Delta \gamma^s \underline{\underline{N}}^s \right)$$

#### • Dérivée par rapport à $\Delta \underline{\underline{E}}$

$$\frac{\partial R_{\underline{\underline{E}}}}{\partial \Delta \underline{\underline{E}}} = \underline{\underline{1}} - \frac{\partial \underline{\underline{A}} \cdot \underline{\underline{E}}}{\partial \underline{\underline{E}}} : \frac{\partial \underline{\underline{E}}}{\partial \Delta \underline{\underline{E}}} + \frac{\partial \underline{\underline{E}} \cdot \underline{\underline{B}}}{\partial \underline{\underline{E}}} : \frac{\partial \underline{\underline{E}}}{\partial \Delta \underline{\underline{E}}}$$

avec  $\underline{\underline{E}} = \underline{\underline{E}}_t + \Delta \underline{\underline{E}}$ ,  $\underline{\underline{A}} = \Delta \underline{\underline{F}} \cdot \underline{\underline{F}}^{-1}$  et  $\underline{\underline{B}} = \sum_s \Delta \gamma^s \underline{\underline{N}}^s$ .

D'où,

$$\frac{\partial \underline{\underline{E}}}{\partial \Delta \underline{\underline{E}}} = \frac{\partial (\underline{\underline{E}}_t + \Delta \underline{\underline{E}})}{\partial \Delta \underline{\underline{E}}} = \underline{\underline{1}},$$

$$\frac{\partial \underline{\underline{A}} \cdot \underline{\underline{E}}}{\partial \underline{\underline{E}}} = \frac{\partial A_{im} E_{mj}}{\partial E_{kl}} = A_{im} \frac{\partial E_{mj}}{\partial E_{kl}} = A_{im} \delta_{mk} \delta_{jl} = A_{ik} \delta_{jl} = \underline{\underline{A}} \otimes \underline{\underline{1}}$$

$$\frac{\partial \underline{\underline{E}} \cdot \underline{\underline{B}}}{\partial \underline{\underline{E}}} = \frac{\partial E_{im} B_{mj}}{\partial E_{kl}} = \frac{\partial E_{im}}{\partial E_{kl}} B_{mj} = \delta_{ik} \delta_{ml} B_{mj} = \delta_{ik} B_{lj} = \delta_{ik} B_{jl}^T = \underline{\underline{1}} \otimes \underline{\underline{B}}^T$$

Ici, on rappelle les trois produits tensoriels du second ordre par :

$$\underline{\underline{C}} = \underline{\underline{A}} \otimes \underline{\underline{B}} \Rightarrow C_{ijkl} = A_{ij} B_{kl}$$

$$\underline{\underline{C}} = \underline{\underline{A}} \otimes \underline{\underline{B}} \Rightarrow C_{ijkl} = A_{ik} B_{jl}$$

$$\underline{\underline{C}} = \underline{\underline{A}} \otimes \underline{\underline{B}} \Rightarrow C_{ijkl} = A_{il} B_{jk}$$

On obtient donc :

$$\frac{\partial R_{\underline{\underline{E}}}}{\partial \Delta \underline{\underline{E}}} = \underline{\underline{1}} - \left( \Delta \underline{\underline{F}} \cdot \underline{\underline{F}}^{-1} \right) \otimes \underline{\underline{1}} + \underline{\underline{1}} \otimes \left( \sum_s \Delta \gamma^s \underline{\underline{N}}^s \right)^T$$

- **Dérivée par rapport à  $\Delta\gamma^u$**

$$\frac{\partial R_E}{\partial \Delta\gamma^u} = \underline{E} \cdot \underline{N}^s \delta_{su}$$

- **Dérivée par rapport à  $\Delta r_D^u$**

$$\frac{\partial R_E}{\partial \Delta r_D^u} = 0$$

- **Dérivée par rapport à  $\Delta r_L^q$**

$$\frac{\partial R_E}{\partial \Delta r_L^q} = 0$$

❖ **Dérivées partielles de  $R_{\gamma^s}$**

$$R_{\gamma^s} = \Delta\gamma^s - \Phi(|\tau^s| - \tau_c^s) \text{sign}(\tau^s) \Delta t, \text{ avec } \Phi(x) = \left\langle \frac{x}{K_0} \right\rangle^n$$

- **Dérivée par rapport à  $\Delta \underline{E}$**

- **Cas 1** : Utilisation du tenseur PK2  $\underline{\Pi}^e$

$$\frac{\partial R_{\gamma^s}}{\partial \Delta \underline{E}} = \frac{\partial R_{\gamma^s}}{\partial \underline{\Pi}^e} : \frac{\partial \underline{\Pi}^e}{\partial \underline{E}_{GL}^e} : \frac{\partial \underline{E}_{GL}^e}{\partial \underline{E}} : \frac{\partial \underline{E}}{\partial \Delta \underline{E}}$$

D'où,

$$\frac{\partial R_{\gamma^s}}{\partial \underline{\Pi}^e} = -\text{signe}(\tau^s) \Delta t \frac{\partial \Phi}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \tau^s} \frac{\partial \tau^s}{\partial \underline{\Pi}^e} = -\text{sign}(\tau^s) \Delta t \Phi' \text{sign}(\tau^s) \underline{N}^s = -\Delta t \Phi' \underline{N}_{sym}^s$$

$$\frac{\partial \underline{\Pi}^e}{\partial \underline{E}_{GL}^e} = \underline{\Lambda}^e$$

$$\frac{\partial \underline{E}_{GL}^e}{\partial \underline{E}} = \frac{\partial E_{GLij}^e}{\partial E_{kl}} = \frac{1}{2} \frac{\partial (E_{im}^T E_{mj} + \delta_{ij})}{\partial E_{kl}} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial E_{mi}}{\partial E_{kl}} E_{mj} + E_{mi} \frac{\partial E_{mj}}{\partial E_{kl}} \right)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial E_{GLij}^e}{\partial E_{kl}} = \frac{1}{2} (\delta_{mk} \delta_{il} E_{mj} + E_{mi} \delta_{mk} \delta_{jl}) = \frac{1}{2} (\delta_{il} E_{kj} + E_{ki} \delta_{jl}) = \frac{1}{2} (\delta_{il} E_{jk}^T + E_{ik}^T \delta_{jl})$$



$$\Rightarrow \frac{\partial \underline{E}_{GL}^e}{\partial \underline{E}} = \frac{1}{2} \left( \underline{1} \otimes \underline{E}^T + \underline{E}^T \otimes \underline{1} \right)$$

$$\frac{\partial \underline{E}}{\partial \Delta \underline{E}} = \underline{1}$$

On obtient alors :

$$\underline{\frac{\partial R_{\gamma^s}}{\partial \Delta \underline{E}}} = -\frac{1}{2} \Delta t \Phi' \underline{N}^s : \underline{\Lambda}^e : \left( \underline{1} \otimes \underline{E}^T + \underline{E}^T \otimes \underline{1} \right), \text{ avec } \Phi'(x) = \frac{n}{K_0} \left\langle \frac{x}{K_0} \right\rangle^{n-1}$$

- **Cas 2** : Utilisation du tenseur Mandel  $\underline{M}$

$$\frac{\partial R_{\gamma^s}}{\partial \Delta \underline{E}} = \frac{\partial R_{\gamma^s}}{\partial \underline{M}} : \frac{\partial \underline{M}}{\partial \underline{C}^e} : \frac{\partial \underline{C}^e}{\partial \underline{E}} : \frac{\partial \underline{E}}{\partial \Delta \underline{E}}$$

D'où,

$$\frac{\partial R_{\gamma^s}}{\partial \underline{M}} = -\text{signe}(\tau^s) \Delta t \frac{\partial \Phi}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \tau^s} \frac{\partial \tau^s}{\partial \underline{M}} = -\text{sign}(\tau^s) \Delta t \Phi' \text{sign}(\tau^s) \underline{N}^s = -\Delta t \Phi' \underline{N}^s$$

$$\text{avec } \Phi'(x) = \frac{n}{K_0} \left\langle \frac{x}{K_0} \right\rangle^{n-1}$$

$$\frac{\partial \underline{M}}{\partial \underline{C}^e} = \frac{\partial \left[ \underline{C}^e \cdot \left( \underline{\Lambda}^e : \frac{1}{2} (\underline{C}^e - \underline{1}) \right) \right]}{\partial \underline{C}^e} = \left( \underline{1} \otimes \underline{\Pi}^e \right) + \left( \underline{C}^e \otimes \underline{1} \right) : \frac{1}{2} \underline{\Lambda}^e = \left( \underline{1} \otimes \underline{\Pi}^e \right) + \frac{1}{2} \left( \underline{C}^e \otimes \underline{1} \right) : \underline{\Lambda}^e$$

$$\frac{\partial \underline{C}^e}{\partial \underline{E}} = \frac{\partial (\underline{E}^T \cdot \underline{E})}{\partial \underline{E}} = \frac{\partial E_{mi}}{\partial E_{kl}} E_{mj} + E_{mi} \frac{\partial E_{mj}}{\partial E_{kl}} = \delta_{mk} \delta_{il} E_{mj} + E_{mi} \delta_{mk} \delta_{jl} = \delta_{il} E_{jk}^T + E_{ik}^T \delta_{jl}$$

$$= \underline{1} \otimes \underline{E}^T + \underline{E}^T \otimes \underline{1}$$

$$\frac{\partial \underline{E}}{\partial \Delta \underline{E}} = \underline{1}$$

On obtient donc :

$$\underline{\frac{\partial R_{\gamma^s}}{\partial \Delta \underline{E}}} = -\Delta t \Phi' \underline{N}^s : \left[ \left( \underline{1} \otimes \underline{\Pi}^e \right) + \frac{1}{2} \left( \underline{C}^e \otimes \underline{1} \right) : \underline{\Lambda}^e \right] : \left( \underline{1} \otimes \underline{E}^T + \underline{E}^T \otimes \underline{1} \right), \text{ avec } \Phi'(x) = \frac{n}{K_0} \left\langle \frac{x}{K_0} \right\rangle^{n-1}$$

- **Dérivée par rapport à  $\Delta \gamma^u$**

$$\frac{\partial R_{\gamma^s}}{\partial \Delta \gamma^u} = \delta_{su}$$

- **Dérivée par rapport à  $\Delta r_D^u$**

$$\frac{\partial R_{\gamma^s}}{\partial \Delta r_D^u} = \frac{\partial R_{\gamma^s}}{\partial \tau_c^s} \frac{\partial \tau_c^s}{\partial \Delta r_D^u}$$

D'où,

$$\frac{\partial R_{\gamma^s}}{\partial \tau_c^s} = -\text{sign}(\tau^s) \Delta t \frac{\partial \Phi}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \tau_c^s} = -\text{sign}(\tau^s) \Delta t \Phi'(-1) = \text{sign}(\tau^s) \Delta t \Phi'$$

avec le modèle « racine de la somme » :

$$\frac{\partial \tau_c^s}{\partial \Delta r_D^u} \stackrel{(a)}{=} \frac{\partial \left( \tau_0 + \mu \sqrt{\sum_u^{12} a^{su} r_D^u + \alpha_L^2 \sum_p^4 r_L^p} \right)}{\partial \Delta r_D^u} = \frac{1}{2} \mu a^{su} \left( \sqrt{\sum_u^{12} a^{su} r_D^u + \alpha_L^2 \sum_p^4 r_L^p} \right)^{-1}$$

ou avec le modèle « somme des racines » :

$$\frac{\partial \tau_c^s}{\partial \Delta r_D^u} \stackrel{(b)}{=} \frac{\partial \left( \tau_0 + \mu \left( \sqrt{\sum_u^{12} a^{su} r_D^u} + \alpha_L \sqrt{\sum_p^4 r_L^p} \right) \right)}{\partial \Delta r_D^u} = \frac{1}{2} \mu a^{su} \left( \sqrt{\sum_u^{12} a^{su} r_D^u} \right)^{-1}$$

Donc, on obtient :

$$\frac{\partial R_{\gamma^s}}{\partial \Delta r_D^u} \stackrel{(a)}{=} \frac{1}{2} \text{sign}(\tau^s) \Delta t \Phi' \mu a^{su} \left( \sqrt{\sum_u^{12} a^{su} r_D^u + \alpha_L^2 \sum_p^4 r_L^p} \right)^{-1}, \text{ avec } \Phi'(x) = \frac{n}{K_0} \left\langle \frac{x}{K_0} \right\rangle^{n-1}$$

ou

$$\frac{\partial R_{\gamma^s}}{\partial \Delta r_D^u} \stackrel{(b)}{=} \frac{1}{2} \text{sign}(\tau^s) \Delta t \Phi' \mu a^{su} \left( \sqrt{\sum_u^{12} a^{su} r_D^u} \right)^{-1}$$

- **Dérivée par rapport à  $\Delta r_L^q$**

$$\frac{\partial R_{\gamma^s}}{\partial \Delta r_L^q} = \frac{\partial R_{\gamma^s}}{\partial \tau_c^s} \frac{\partial \tau_c^s}{\partial \Delta r_L^q}$$

D'où,

$$\frac{\partial R_{\gamma^s}}{\partial \tau_c^s} = -\text{sign}(\tau^s) \Delta t \frac{\partial \Phi}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \tau_c^s} = -\text{sign}(\tau^s) \Delta t \Phi'(-1) = \text{sign}(\tau^s) \Delta t \Phi'$$

avec le modèle « racine de la somme » :

$$\frac{\partial \tau_c^s}{\partial \Delta r_L^q} \stackrel{(a)}{=} \frac{\partial \left( \tau_0 + \mu \sqrt{\sum_u^{12} a^{su} r_D^u + \alpha_L^2 \sum_p^4 r_L^p} \right)}{\partial \Delta r_L^q} = \frac{1}{2} \mu \alpha_L^2 \left( \sqrt{\sum_u^{12} a^{su} r_D^u + \alpha_L^2 \sum_p^4 r_L^p} \right)^{-1}$$

ou avec le modèle « somme des racines » :

$$\frac{\partial \tau_c^s}{\partial \Delta r_L^q} \stackrel{(b)}{=} \frac{\partial \left( \tau_0 + \mu \sqrt{\sum_u^{12} a^{su} r_D^u} + \alpha_L \sqrt{\sum_p^4 r_L^p} \right)}{\partial \Delta r_L^q} = \frac{1}{2} \mu \alpha_L \left( \sqrt{\sum_p^4 r_L^p} \right)^{-1}$$

Enfin, on obtient :

$$\frac{\partial R_{\gamma^s}}{\partial \Delta r_L^q} \stackrel{(a)}{=} \frac{1}{2} \text{sign}(\tau^s) \Delta t \Phi' \mu \alpha_L^2 \left( \sqrt{\sum_u^{12} a^{su} r_D^u + \alpha_L^2 \sum_p^4 r_L^p} \right)^{-1}, \text{ avec } \Phi'(x) = \frac{n}{K_0} \left\langle \frac{x}{K_0} \right\rangle^{n-1}$$

ou

$$\frac{\partial R_{\gamma^s}}{\partial \Delta r_L^q} \stackrel{(b)}{=} \frac{1}{2} \text{sign}(\tau^s) \Delta t \Phi' \mu \alpha_L \left( \sqrt{\sum_p^4 r_L^p} \right)^{-1}$$

### ❖ Dérivées partielles de $R_{r_D^s}$

avec le modèle « racine de la somme » :

$$R_{r_D^s} \stackrel{(a)}{=} \Delta r_D^s - |\Delta \gamma^s| \left( \frac{\sqrt{\sum_u^{12} b^{su} (r_{D_t}^u + \Delta r_{D_t}^u) + K_{dl} \sum_p^4 r_L^p}}{\kappa} - G_c(r_{D_t}^s + \Delta r_{D_t}^s) \right)$$

ou avec le modèle « somme des racines » :

$$R_{r_D^s} \stackrel{(b)}{=} \Delta r_D^s - |\Delta \gamma^s| \left( \frac{\sqrt{\sum_u^{12} b^{su} (r_{D_t}^u + \Delta r_{D_t}^u) + K_{dl} \sqrt{\sum_p^4 r_L^p}}}{\kappa} - G_c(r_{D_t}^s + \Delta r_{D_t}^s) \right)$$

- **Dérivée par rapport à  $\Delta \underline{E}$**

$$\frac{\partial R_{r_D^s}}{\partial \Delta \underline{E}} = \underline{0}$$

- **Dérivée par rapport à  $\Delta \gamma^u$**

$$\frac{\partial R_{r_D^s}}{\partial \Delta \gamma^u} \stackrel{(a)}{=} - \text{sign}(\Delta \gamma^s) \delta_{su} \left( \frac{\sqrt{\sum_u^{12} b^{su} r_D^u + K_{dl} \sum_p^4 r_L^p}}{\kappa} - G_c r_D^s \right)$$

ou

$$\frac{\partial R_{r_D^s}^{(b)}}{\partial \Delta \gamma^u} = - \text{sign}(\Delta \gamma^s) \delta_{su} \left( \frac{\sqrt{\sum_u b^{su} r_D^u} + K_{dl} \sqrt{\sum_p r_L^p}}{\kappa} - G_c r_D^s \right)$$

- **Dérivée par rapport à  $\Delta r_D^u$**

$$\frac{\partial R_{r_D^s}^{(a)}}{\partial \Delta r_D^u} = \delta_{su} - |\Delta \gamma^s| \left( \frac{1}{2\kappa} b^{su} \left( \sum_u b^{su} r_D^u + K_{dl} \sum_p r_L^p \right)^{\frac{1}{2}} - G_c \delta_{su} \right)$$

ou

$$\frac{\partial R_{r_D^s}^{(b)}}{\partial \Delta r_D^u} = \delta_{su} - |\Delta \gamma^s| \left( \frac{1}{2\kappa} b^{su} \left( \sum_u b^{su} r_D^u \right)^{\frac{1}{2}} - G_c \delta_{su} \right)$$

- **Dérivée par rapport à  $\Delta r_L^q$**

$$\frac{\partial R_{r_D^s}^{(a)}}{\partial \Delta r_L^q} = - |\Delta \gamma^s| \left( \frac{1}{2\kappa} K_{dl} \left( \sum_u b^{su} r_D^u + K_{dl} \sum_p r_L^p \right)^{\frac{1}{2}} \right)$$

ou

$$\frac{\partial R_{r_D^s}^{(b)}}{\partial \Delta r_L^q} = - |\Delta \gamma^s| \frac{1}{2\kappa} \left( \frac{K_{dl}}{\sum_p r_L^p} \right)^{\frac{1}{2}}$$

- ❖ **Dérivées partielles de  $R_{r_L^p}$**

$$R_{r_L^p} = \Delta r_L^p + A_L (r_{L_t}^p + \Delta r_{L_t}^p - r_L^{sat}) \left( \sum_{s \in \text{plan}(p)} |\Delta \gamma^s| \right) \left( \sum_{s \in \text{plan}(p)} (r_{D_t}^s + \Delta r_{D_t}^s) \right)$$

- **Dérivée par rapport à  $\Delta \underline{\underline{E}}$**

$$\frac{\partial R_{r_L^p}}{\partial \Delta \underline{\underline{E}}} = \underline{\underline{0}}$$

- **Dérivée par rapport à  $\Delta \gamma^u$**

$$\frac{\partial R_{r_L^p}}{\partial \Delta \gamma^u} = A_L (r_L^p - r_L^{sat}) \left( \sum_{u \in \text{plan}(p)}^3 r_D^u \right) \text{sign}(\Delta \gamma^u), \text{ si } u \in p$$

- **Dérivée par rapport à  $\Delta r_D^u$**

$$\frac{\partial R_{r_L^p}}{\partial \Delta r_D^u} = A_L (r_L^p - r_L^{sat}) \left( \sum_{u \in \text{plan}(p)}^3 |\Delta \gamma^u| \right), \text{ si } u \in p$$

- **Dérivée par rapport à  $\Delta r_L^q$**

$$\frac{\partial R_{r_L^p}}{\partial \Delta r_L^q} = \delta_{pq} \left( 1 + A_L \left( \sum_{s \in \text{plan}(p)}^3 |\Delta \gamma^s| \right) \left( \sum_{s \in \text{plan}(p)}^3 (r_D^s) \right) \right)$$

## Annexe I. 4 : Approximation de la variable interne $\underline{\underline{E}}$ par le schéma d'Euler implicite

En appliquant le schéma d'Euler implicite, on a :  $\underline{\underline{P}}_{n+1} = \exp \left\{ \Delta t L_{n+1}^p \right\} \underline{\underline{P}}_n$

Le tenseur d'essai est défini comme :  $\underline{\underline{E}}^* = \underline{\underline{F}}_{n+1} \cdot \underline{\underline{P}}_n^{-1}$ , avec  $\underline{\underline{F}}_{n+1} = \underline{\underline{E}}_{n+1} \cdot \underline{\underline{P}}_{n+1}$ .

On peut en déduire :  $\underline{\underline{E}}^* = \underline{\underline{E}}_{n+1} \exp \left\{ \sum_s \Delta \gamma^s \underline{\underline{N}}^s \right\} \approx \underline{\underline{E}}^* \cdot \left( \underline{\underline{1}} + \sum_s \Delta \gamma^s \underline{\underline{N}}^s \right)$

Finalement, on obtient la dérivée partielle par rapport à  $\underline{\underline{E}}$  :

$$\frac{\partial R_{\underline{\underline{E}}}}{\partial \Delta \underline{\underline{E}}} = \underline{\underline{1}} + \underline{\underline{1}} \otimes \left( \sum_s \Delta \gamma^s \underline{\underline{N}}^s \right)^T$$

Cette dérivée partielle sans approximation calculée dans l'Annexe I. 3 donne :

$$\frac{\partial R_{\underline{\underline{E}}}}{\partial \Delta \underline{\underline{E}}} = \underline{\underline{1}} - \left( \Delta \underline{\underline{F}} \cdot \underline{\underline{F}}^{-1} \right) \otimes \underline{\underline{1}} + \underline{\underline{1}} \otimes \left( \sum_s \Delta \gamma^s \underline{\underline{N}}^s \right)^T$$

La différence entre les dérivées partielles sans approximation et avec approximation est  $\left( \Delta \underline{\underline{F}} \cdot \underline{\underline{F}}^{-1} \right) \otimes \underline{\underline{1}}$ . Ce terme joue un rôle mineur dans l'expression.

## Annexe I. 5 : Matrice tangente cohérente pour la formulation Updated\_Lagrangian

Dans le cadre de la méthode des éléments finis, sur le principe des puissances virtuelles, la puissance virtuelle des efforts intérieurs peut s'exprimer différemment, en utilisant le tenseur de contrainte de Cauchy  $\underline{\underline{\sigma}}$ , le premier tenseur de Piola-Kirchhoff (PK1)  $\underline{\underline{S}}$  et le second tenseur de Piola-Kirchhoff  $\underline{\underline{\Pi}}$  :

$$\begin{aligned}
 P_i &= \int_{\Omega} \underline{\underline{\sigma}} : D d\Omega & P_i &= \int_{\Omega} \underline{\underline{\sigma}} : D d\Omega \\
 &= \frac{1}{J_F} \int_{\Omega_0} (\underline{\underline{S}} \cdot \underline{\underline{F}}^T) : (\dot{\underline{\underline{F}}} \cdot \underline{\underline{F}}^{-1}) d\Omega_0 & \text{ou} & = \frac{1}{J_F} \int_{\Omega_0} (\underline{\underline{F}} \cdot \underline{\underline{\Pi}} \cdot \underline{\underline{F}}^T) : (\dot{\underline{\underline{F}}} \cdot \underline{\underline{F}}^{-1}) d\Omega_0 \\
 &= \frac{1}{J_F} \int_{\Omega_0} S_{im} F_{jm} \dot{F}_{in} F_{nj}^{-1} d\Omega_0 & & = \frac{1}{J_F} \int_{\Omega_0} F_{im} \Pi_{mn} F_{jn} \dot{F}_{ik} F_{kj}^{-1} d\Omega_0 \\
 &= \frac{1}{J_F} \int_{\Omega_0} S_{im} \dot{F}_{im} d\Omega_0 = \int_{\Omega_0} \underline{\underline{S}} : \dot{\underline{\underline{F}}} d\Omega_0 & & = \frac{1}{J_F} \int_{\Omega_0} F_{im} \Pi_{mn} \dot{F}_{in} d\Omega_0 = \int_{\Omega_0} \underline{\underline{\Pi}} : \dot{\underline{\underline{E}}}_{GL} d\Omega_0
 \end{aligned}$$

avec  $\underline{\underline{S}} = J_F \underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{\underline{F}}^{-T}$ ,  $\underline{\underline{\Pi}} = J_F \underline{\underline{F}}^{-1} \cdot \underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{\underline{F}}^{-T}$ ,  $\underline{\underline{E}}_{GL} = \frac{1}{2} (\underline{\underline{F}}^T \cdot \underline{\underline{F}} - \underline{\underline{1}})$  et  $J_F = \det \underline{\underline{F}}$ .

On obtient donc les différentes expressions de la puissance virtuelle des efforts intérieurs :

$$\begin{array}{ccc}
 P_i = \int_{\Omega} \underline{\underline{\sigma}} : D d\Omega = \int_{\Omega_0} \underline{\underline{S}} : \dot{\underline{\underline{F}}} d\Omega_0 = \int_{\Omega_0} \underline{\underline{\Pi}} : \dot{\underline{\underline{E}}}_{GL} d\Omega_0 & & \\
 \swarrow & \downarrow & \searrow \\
 \text{Updated\_Lagrangian} & \text{Lagrangian\_PK1} & \text{Total\_Lagrangian}
 \end{array}$$

Comme indiqué ci-dessus, l'utilisation des différents tenseurs de contrainte nous permet de construire différentes formulations lagrangiennes dans la configuration initiale ou actuelle. Cependant, dans le cadre des grandes transformations, il est difficile d'appliquer la formulation lagrangienne totale classique, car le tenseur gradient de déformation Green-Lagrange  $\underline{\underline{E}}_{GL}$  est mal maîtrisé pour réaliser une matrice tangente cohérente. Pour cette raison, une nouvelle formulation lagrangienne totale basée sur le tenseur de PK1 a été développée pour adapter notre modélisation numérique. La construction de la matrice tangente cohérente liée à cette formulation sont donnée dans la note technique [Han (2011)]. Ici, on ne présente que la démarche pour obtenir la matrice tangente cohérente avec la formulation Updated\_Lagrangian.

Pour commencer à calculer la matrice tangente cohérente, d'une façon générale, les résidus du système d'équations non linéaires peuvent s'exprimer par :

$$[R] = \begin{bmatrix} R_E \\ R_\gamma \\ R_r \end{bmatrix}$$

Pour évaluer l'influence d'une petite perturbation de  $\underline{\underline{F}}$  autour de son estimation actuelle sur les variables internes  $v_i$ , on impose que la variation du résidu doit rester nulle :  $\delta[R] = [0]$ . Ceci implique pour chaque résidu, on a :

$$\delta R = \frac{\partial R}{\partial \Delta v_i} \cdot \delta \Delta v_i + \frac{\partial R}{\partial \Delta \underline{\underline{F}}} \cdot \delta \Delta \underline{\underline{F}} = 0$$

$$\delta \Delta v_i = -[J]^* \cdot \frac{\partial R}{\partial \Delta \underline{\underline{F}}} \cdot \delta \Delta \underline{\underline{F}} \text{ avec } [J]^* = [J]^{-1} = \left[ \frac{\partial R}{\partial \Delta v_i} \right]^{-1}$$

Selon les expressions des résidus, seulement le terme de  $R_{\underline{\underline{E}}}$  qui a une relation directe avec  $\Delta \underline{\underline{F}}$ .

On peut donc obtenir :  $\frac{\partial \Delta \underline{\underline{E}}}{\partial \Delta \underline{\underline{F}}} = -[J]_{ee}^* \cdot \frac{\partial R_{\underline{\underline{E}}}}{\partial \Delta \underline{\underline{F}}}$ , avec  $[J]_{ee}^*$  la sous matrice au terme  $\underline{\underline{E}}$  dans la matrice

$$[J]^{-1} = [J]^* = \begin{bmatrix} [J]_{ee}^* & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & [J]_{\gamma\gamma}^* & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & [J]_{\rho\rho}^* & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & [J]_{r_e r_e}^* \end{bmatrix}$$

Comme on a  $R_{\underline{\underline{E}}} = \Delta \underline{\underline{E}} - \Delta \underline{\underline{F}} \cdot \underline{\underline{F}}^{-1} \underline{\underline{E}} + \underline{\underline{E}} \cdot \left( \sum_s \Delta \gamma^s \underline{\underline{N}}^s \right)$ , le seul terme à calculer est

$$\frac{\partial R_{\underline{\underline{E}}}}{\partial \Delta \underline{\underline{F}}} = - \frac{\partial}{\partial \Delta \underline{\underline{F}}} (\Delta \underline{\underline{F}} \cdot \underline{\underline{F}}^{-1} \cdot \underline{\underline{E}}) :$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \Delta \underline{\underline{F}}} (\Delta \underline{\underline{F}} \cdot \underline{\underline{F}}^{-1} \cdot \underline{\underline{E}}) &= \underline{\underline{1}} \otimes (\underline{\underline{F}}^{-1} \cdot \underline{\underline{E}})^T + \frac{\partial}{\partial \Delta \underline{\underline{F}}} (\underline{\underline{A}} \cdot \underline{\underline{F}}^{-1} \cdot \underline{\underline{B}}) \\ &= \underline{\underline{1}} \otimes (\underline{\underline{E}}^T \cdot \underline{\underline{F}}^{-T}) + \frac{\partial}{\partial \underline{\underline{F}}^{-1}} (\underline{\underline{A}} \cdot \underline{\underline{F}}^{-1} \cdot \underline{\underline{B}}) : \frac{\partial \underline{\underline{F}}^{-1}}{\partial \underline{\underline{F}}} : \frac{\partial \underline{\underline{F}}}{\partial \Delta \underline{\underline{F}}} \end{aligned}$$

$$\text{D'où } \frac{\partial}{\partial \underline{\underline{F}}^{-1}} (\underline{\underline{A}} \cdot \underline{\underline{F}}^{-1} \cdot \underline{\underline{B}}) = \underline{\underline{A}} \otimes \underline{\underline{B}}^T = \Delta \underline{\underline{F}} \otimes \underline{\underline{E}}^T, \quad \frac{\partial \underline{\underline{F}}^{-1}}{\partial \underline{\underline{F}}} = -\underline{\underline{F}}^{-1} \otimes \underline{\underline{F}}^{-T} \text{ et } \frac{\partial \underline{\underline{F}}}{\partial \Delta \underline{\underline{F}}} = \underline{\underline{1}}$$

On obtient donc :

$$\frac{\partial \Delta \underline{\underline{E}}}{\partial \Delta \underline{\underline{F}}} = -[J]_{ee}^* \cdot \frac{\partial R_{\underline{\underline{E}}}}{\partial \Delta \underline{\underline{F}}} = [J]_{ee}^* \cdot \left[ \underline{\underline{1}} \otimes (\underline{\underline{E}}^T \cdot \underline{\underline{F}}^{-T}) - (\Delta \underline{\underline{F}} \otimes \underline{\underline{E}}^T) : (\underline{\underline{F}}^{-1} \otimes \underline{\underline{F}}^{-T}) \right]$$

Avec une formulation lagrangienne réactualisé, à l'aide de la littérature [Belytschko et al. (2001)], la notion de l'hypoélasticité en supposant un taux de déformation produit un taux de contrainte dépendamment l'état de contrainte précédent, peut nous inspirer des idées pour construire la matrice tangente cohérente. Pour satisfaire au principe d'objectivité, la loi constitutive peut s'écrire sous la forme :

$$\underline{\underline{\sigma}}^\nabla = \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{D}}$$

où  $\underline{\underline{\sigma}}^\nabla$  représente le taux objectif de contrainte,  $\underline{\underline{C}}$  est le tenseur d'ordre 4 présentant la matrice tangente, et  $\underline{\underline{D}}$  donne la partie symétrique du gradient du vecteur vitesse :

$$\underline{\underline{D}} = \text{sym}(\underline{\underline{L}}) = \frac{1}{2}(\underline{\underline{\dot{F}}} \cdot \underline{\underline{F}}^{-1} + \underline{\underline{F}}^{-T} \cdot \underline{\underline{\dot{F}}}^T).$$

Ici, on définit le tenseur de contrainte Kirchhoff-Cauchy  $\underline{\underline{\tau}}_{KC} = J\underline{\underline{\sigma}}$ , avec  $J = \det(\underline{\underline{F}})$  et  $\underline{\underline{\sigma}}$  la contrainte de Cauchy. En posant  $\frac{\partial(\underline{\underline{\tau}}_{KC})}{\partial \underline{\underline{F}}} = J\underline{\underline{C}}^* : \underline{\underline{D}}$ , on peut déduire :

$$\frac{\partial(\underline{\underline{\tau}}_{KC})}{\partial \underline{\underline{F}}} = \frac{\partial(\underline{\underline{\tau}}_{KC})}{\partial \underline{\underline{F}}} : \frac{\partial \underline{\underline{F}}}{\partial t} = \frac{1}{2} J\underline{\underline{C}}^* : (\underline{\underline{\dot{F}}} \cdot \underline{\underline{F}}^{-1} + \underline{\underline{F}}^{-T} \cdot \underline{\underline{\dot{F}}}^T)$$

Si on pose  $\frac{\partial(\underline{\underline{\tau}}_{KC})}{\partial \underline{\underline{F}}} = \underline{\underline{K}}$ , on a :

$$\underline{\underline{K}} : \underline{\underline{\dot{F}}} = \frac{1}{2} J\underline{\underline{C}}^* : (\underline{\underline{\dot{F}}} \cdot \underline{\underline{F}}^{-1} + \underline{\underline{F}}^{-T} \cdot \underline{\underline{\dot{F}}}^T)$$

$$K_{ijkl} \dot{F}_{kl} = \frac{1}{2} J C_{ijmn}^* (\dot{F}_{mp} F_{pn}^{-1} + F_{mq}^{-T} \dot{F}_{qn}^T) = \frac{1}{2} J C_{ijmn}^* (\dot{F}_{mp} F_{pn}^{-1} + F_{qm}^{-1} \dot{F}_{nq}^T)$$

Comme  $\underline{\underline{\tau}}_{KC}$  et  $\underline{\underline{D}}$  sont des tenseurs symétriques, le tenseur d'ordre 4  $\underline{\underline{C}}^*$  est donc aussi symétrique. En confondant les indices  $m$  et  $n$ , on peut trouver une expression simplifiée :

$$\begin{aligned} K_{ijkl} \dot{F}_{kl} &= J C_{ijmn}^* \dot{F}_{mp} F_{pn}^{-1} \\ \Rightarrow K_{ijkl} \dot{F}_{kl} \dot{F}_{lk}^{-1} &= J C_{ijmn}^* \dot{F}_{mp} F_{pn}^{-1} \dot{F}_{lk}^{-1} \\ &\stackrel{m=k}{p=l} \Rightarrow K_{ijkl} = J C_{ijkn}^* F_{nl}^{-T} \\ \Rightarrow K_{ijkl} F_{ln}^T &= J C_{ijkn}^* \end{aligned}$$

Finalement, on obtient  $\frac{\partial(\underline{\underline{\tau}}_{KC})}{\partial \underline{\underline{F}}} \cdot \underline{\underline{F}}^T = J\underline{\underline{C}}^*$  :

$$\underline{\underline{C}}^* = \frac{1}{J} \frac{\partial(\underline{\underline{\tau}}_{KC})}{\partial \underline{\underline{F}}} \cdot \underline{\underline{F}}^T = \frac{1}{J} \frac{\partial(J\underline{\underline{\sigma}})}{\partial \underline{\underline{F}}} \cdot \underline{\underline{F}}^T = \frac{1}{J} \left( \underline{\underline{\sigma}} \otimes \frac{\partial J}{\partial \underline{\underline{F}}} + J \frac{\partial \underline{\underline{\sigma}}}{\partial \underline{\underline{F}}} \right) \cdot \underline{\underline{F}}^T$$

avec  $\frac{\partial J}{\partial \underline{\underline{F}}} = J \underline{\underline{F}}^{-T}$  et

$$\frac{\partial \underline{\underline{\sigma}}}{\partial \Delta \underline{\underline{F}}} = \frac{\partial \underline{\underline{\sigma}}}{\partial \underline{\underline{E}}} : \frac{\partial \underline{\underline{E}}}{\partial \Delta \underline{\underline{E}}} : \frac{\partial \Delta \underline{\underline{E}}}{\partial \Delta \underline{\underline{F}}}, \text{ avec } \underline{\underline{\sigma}} = \frac{1}{\det \underline{\underline{E}}} \cdot \underline{\underline{E}} \cdot \underline{\underline{\Pi}}^e \cdot \underline{\underline{E}}^T, \det \underline{\underline{E}} = J_E$$

D'où,



$$\frac{\partial \underline{\underline{\sigma}}}{\partial \underline{\underline{E}}} = \frac{\partial}{\partial \underline{\underline{E}}} \left( \frac{1}{\det \underline{\underline{E}}} \cdot \underline{\underline{E}} \cdot \underline{\underline{\Pi}}^e \cdot \underline{\underline{E}}^T \right) = \frac{1}{J_E} \frac{\partial}{\partial \underline{\underline{E}}} (\underline{\underline{E}} \cdot \underline{\underline{\Pi}}^e \cdot \underline{\underline{E}}^T) + (\underline{\underline{E}} \cdot \underline{\underline{\Pi}}^e \cdot \underline{\underline{E}}^T) \otimes \frac{\partial}{\partial \underline{\underline{E}}} \left( \frac{1}{\det \underline{\underline{E}}} \right)$$

avec

$$\begin{aligned} & \frac{1}{J_E} \frac{\partial}{\partial \underline{\underline{E}}} (\underline{\underline{E}} \cdot \underline{\underline{\Pi}}^e \cdot \underline{\underline{E}}^T) \\ &= \frac{1}{J_E} \left\{ \left[ \underline{\underline{1}} \otimes (\underline{\underline{\Pi}}^e \cdot \underline{\underline{E}}^T)^T \right] : \frac{\partial \underline{\underline{E}}}{\partial \underline{\underline{E}}} + \left[ (\underline{\underline{E}} \cdot \underline{\underline{\Pi}}^e) \otimes \underline{\underline{1}} \right] : \frac{\partial \underline{\underline{E}}^T}{\partial \underline{\underline{E}}} + \frac{\partial}{\partial \underline{\underline{\Pi}}^e} (\underline{\underline{E}} \cdot \underline{\underline{\Pi}}^e \cdot \underline{\underline{E}}^T) : \frac{\partial \underline{\underline{\Pi}}^e}{\partial \underline{\underline{E}}_{GL}} : \frac{\partial \underline{\underline{E}}_{GL}}{\partial \underline{\underline{E}}} \right\} \\ &= \frac{1}{J_E} \left[ \underline{\underline{1}} \otimes (\underline{\underline{E}} \cdot \underline{\underline{\Pi}}^{eT}) + (\underline{\underline{E}} \cdot \underline{\underline{\Pi}}^e) \otimes \underline{\underline{1}} + (\underline{\underline{E}} \otimes \underline{\underline{E}}) : \underline{\underline{\Lambda}} : \frac{1}{2} (\underline{\underline{1}} \otimes \underline{\underline{E}}^T + \underline{\underline{E}}^T \otimes \underline{\underline{1}}) \right] \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} & (\underline{\underline{E}} \cdot \underline{\underline{\Pi}}^e \cdot \underline{\underline{E}}^T) \otimes \frac{\partial}{\partial \underline{\underline{E}}} \left( \frac{1}{\det \underline{\underline{E}}} \right) = -\frac{1}{J_E^2} (\underline{\underline{E}} \cdot \underline{\underline{\Pi}}^e \cdot \underline{\underline{E}}^T) \otimes \frac{\partial \det \underline{\underline{E}}}{\partial \underline{\underline{E}}} \\ &= -\frac{1}{J_E^2} (\underline{\underline{E}} \cdot \underline{\underline{\Pi}}^e \cdot \underline{\underline{E}}^T) \otimes (J_E \underline{\underline{E}}^{-T}) = -\frac{1}{J_E} (\underline{\underline{E}} \cdot \underline{\underline{\Pi}}^e \cdot \underline{\underline{E}}^T) \otimes \underline{\underline{E}}^{-T} \end{aligned}$$

$$\text{On a : } \frac{\partial \underline{\underline{\sigma}}}{\partial \underline{\underline{E}}} = \frac{1}{J_E} \left[ \underline{\underline{1}} \otimes (\underline{\underline{E}} \cdot \underline{\underline{\Pi}}^{eT}) + (\underline{\underline{E}} \cdot \underline{\underline{\Pi}}^e) \otimes \underline{\underline{1}} + (\underline{\underline{E}} \otimes \underline{\underline{E}}) : \underline{\underline{\Lambda}} : \frac{1}{2} (\underline{\underline{1}} \otimes \underline{\underline{E}}^T + \underline{\underline{E}}^T \otimes \underline{\underline{1}}) \right] - \frac{1}{J_E} (\underline{\underline{E}} \cdot \underline{\underline{\Pi}}^e \cdot \underline{\underline{E}}^T) \otimes \underline{\underline{E}}^{-T}$$

$$\frac{\partial \underline{\underline{E}}}{\partial \Delta \underline{\underline{E}}} = \underline{\underline{1}}$$

On obtient donc :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \underline{\underline{\sigma}}}{\partial \Delta \underline{\underline{F}}} &= \left\{ \frac{1}{J_E} \left[ \underline{\underline{1}} \otimes (\underline{\underline{E}} \cdot \underline{\underline{\Pi}}^{eT}) + (\underline{\underline{E}} \cdot \underline{\underline{\Pi}}^e) \otimes \underline{\underline{1}} + (\underline{\underline{E}} \otimes \underline{\underline{E}}) : \underline{\underline{\Lambda}} : \frac{1}{2} (\underline{\underline{1}} \otimes \underline{\underline{E}}^T + \underline{\underline{E}}^T \otimes \underline{\underline{1}}) \right] - \frac{1}{J_E} (\underline{\underline{E}} \cdot \underline{\underline{\Pi}}^e \cdot \underline{\underline{E}}^T) \otimes \underline{\underline{E}}^{-T} \right\} \\ &: \left\{ \underline{\underline{J}}_{ee}^* \cdot \left[ \underline{\underline{1}} \otimes (\underline{\underline{E}}^T \cdot \underline{\underline{F}}^{-T}) - (\Delta \underline{\underline{F}} \otimes \underline{\underline{E}}^T) : (\underline{\underline{F}}^{-1} \otimes \underline{\underline{F}}^{-T}) \right] \right\} \end{aligned}$$

On utilise ensuite le taux converti de contrainte de Kirchhoff pour trouver le taux objectif de contrainte de Truesdell  $\underline{\underline{\sigma}}^{\nabla T} = \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{D}}$ , avec  $\underline{\underline{C}}$  la matrice tangente cohérente à déterminer.

$$\underline{\underline{\tau}}^{\nabla c} = \dot{\underline{\underline{\tau}}}_{KC} - \underline{\underline{L}} \cdot \underline{\underline{\tau}} - \underline{\underline{\tau}} \cdot \underline{\underline{L}}^T = J (\dot{\underline{\underline{\sigma}}} - \underline{\underline{L}} \cdot \underline{\underline{\sigma}} - \underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{\underline{L}}^T + \text{trace}(\underline{\underline{L}}) \underline{\underline{\sigma}}) = J \underline{\underline{\sigma}}^{\nabla T}$$

En déduisant l'expression ci-dessus, on peut obtenir :

$$J \underline{\underline{\sigma}}^{\nabla T} = J \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{D}} = \dot{\underline{\underline{\tau}}}_{KC} - \underline{\underline{L}} \cdot \underline{\underline{\tau}} - \underline{\underline{\tau}} \cdot \underline{\underline{L}}^T = J \underline{\underline{C}}^* : \underline{\underline{D}} - J \underline{\underline{L}} \cdot \underline{\underline{\sigma}} - J \underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{\underline{L}}^T$$

Finalement, l'expression de la matrice tangente cohérente dans la configuration lagrangienne réactualisée est donnée par :

$$\underline{\underline{C}} = \underline{\underline{C}}^* - \underline{\underline{C}}', \text{ avec } \underline{\underline{C}}' : \underline{\underline{D}} = \underline{\underline{L}} \cdot \underline{\underline{\sigma}} + \underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{\underline{L}}^T$$

## Annexe I. 6 : Calcul des dérivées partielles des résidus dans le code de calcul Cast3M

On donne dans cette partie le détail du calcul des dérivées partielles des variables internes utilisées dans l'implémentation sous Cast3M :  $\underline{E}_{GL}^e$ ,  $\gamma^s$ ,  $r_D^s$  et  $r_L^p$ . Seulement les termes différents de ceux présentés pour ZébuLoN (**Annexe I. 3**) seront établis ci-dessous :

### ❖ Dérivées partielles de $R_{\underline{E}_{GL}^e}$

$$R_{\underline{E}_{GL}^e} = -\underline{E}_{GL}^{e*} + \underline{E}_{GL}^e + \sum_s \Delta\gamma^s \left\{ \underline{C}^e \cdot \underline{N}^s \right\}$$

Les dérivées partielles du résidu de  $\underline{E}_{GL}^e$  sont identiques avec celles présentées dans la littérature [Nguyen (2010)], dans laquelle les démonstrations sont détaillées. Ici, on n'établit que les résultats.

#### • Dérivée par rapport à $\Delta\underline{E}_{GL}^e$

$$\frac{\partial R_{\underline{E}_{GL}^e}}{\partial \Delta\underline{E}_{GL}^e} = \underline{1} + \frac{1}{2} \sum_s \Delta\gamma^s \left( \underline{N}^{sT} \underline{\otimes} \underline{1} + \underline{N}^{sT} \underline{\otimes} \underline{1} + \underline{1} \underline{\otimes} \underline{N}^{sT} + \underline{1} \underline{\otimes} \underline{N}^{sT} \right)$$

#### • Dérivée par rapport à $\Delta\gamma^u$

$$\frac{\partial R_{\underline{E}_{GL}^e}}{\partial \Delta\gamma^u} = \underline{N}^{uT} \cdot \underline{E}_{GL}^e + \underline{E}_{GL}^e \cdot \underline{N}^u + \underline{N}_{sym}^u$$

#### • Dérivée par rapport à $\Delta r_D^u$ : idem

#### • Dérivée par rapport à $\Delta r_L^q$ : idem

### ❖ Dérivées partielles de $R_{\gamma^s}$

$$R_{\gamma^s} = \Delta\gamma^s - \Phi \left( |\tau^s| - \tau_c^s \right) \text{signe}(\tau^s) \Delta t$$

#### • Dérivée par rapport à $\Delta\underline{E}_{GL}^e$

$$\frac{\partial R_{\gamma^s}}{\partial \Delta\underline{E}_{GL}^e} = \frac{\partial R_{\gamma^s}}{\partial \Phi} \cdot \frac{\partial \Phi}{\partial |\tau^s|} \cdot \frac{\partial |\tau^s|}{\partial \tau^s} \cdot \frac{\partial \tau^s}{\partial \underline{E}_{GL}^e}$$

D'où,

$$\frac{\partial R_{\gamma^s}}{\partial \Phi} = -\text{sign}(\tau^s) \Delta t$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial |\tau^s|} = \Phi'(x) = \frac{n}{K_0} \left\langle \frac{x}{K_0} \right\rangle^{n-1}$$

$$\frac{\partial |\tau^s|}{\partial \tau^s} = \text{sign}(\tau^s)$$

$$\frac{\partial \tau^s}{\partial \underline{\underline{E}}_{GL}^e} \approx 2 \left\{ \underline{\underline{N}}^s \cdot \underline{\underline{\Pi}}^{eT} \right\} + \underline{\underline{\Lambda}} : \underline{\underline{N}}^s \text{ (approximation réalisée par [Nguyen (2010)])}$$

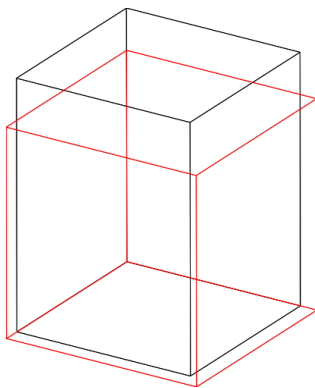
avec  $\{ \}$  la partie symétrique du tenseur.

Finalement, on obtient :

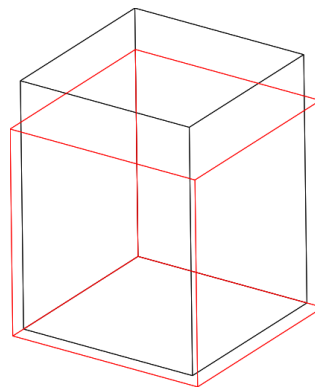
$$\frac{\partial R_{\gamma^s}}{\partial \underline{\underline{E}}_{GL}^e} = -\Delta t \Phi' \left[ 2 \left\{ \underline{\underline{N}}^s \cdot \underline{\underline{\Pi}}^{eT} \right\} + \underline{\underline{\Lambda}} : \underline{\underline{N}}^s \right], \text{ avec } \Phi'(x) = \frac{n}{K_0} \left\langle \frac{x}{K_0} \right\rangle^{n-1}$$

- **Dérivée par rapport à**  $\Delta \gamma^u$  : idem
- **Dérivée par rapport à**  $\Delta r_D^u$  : idem
- **Dérivée par rapport à**  $\Delta r_L^q$  : idem
  
- ❖ **Dérivées partielles de**  $R_{r_D^s}$  : idem
- ❖ **Dérivées partielles de**  $R_{r_L^p}$  : idem

## Annexe I. 7 : Maillages initiaux et déformés pour différents tests sur un élément fini



(a)



(b)

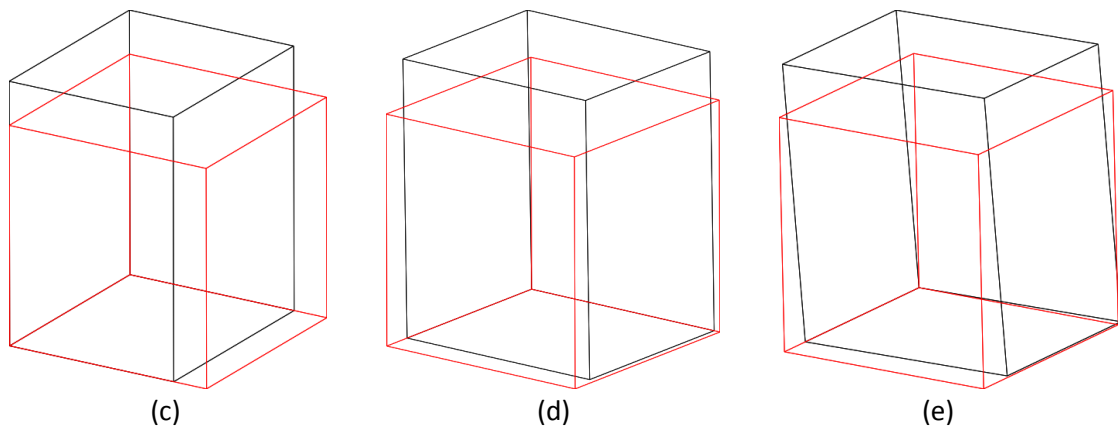


Figure A. 1 : Maillages initiaux et déformés des tests sur un élément fini, suivant : (a)  $[001]$  ; (b)  $[111]$  ; (c)  $[011]$  ; (d)  $[012]$  et (e)  $[125]$ .

## Annexe I. 8 : Méthode géométrique pour obtenir les angles d'Euler à partir d'une orientation cristallographique

Dans un monocristal, l'activation des systèmes de glissement dépend de la direction de traction. Lors d'une simulation numérique, il faut définir une matrice de rotation permettant de réaliser un changement de repère, en passant du repère global au repère cristallographique du matériau exprimé dans le repère global. Comme le montre le **Figure A. 2**, on considère que la direction de traction est suivant une orientation cristallographique du matériau  $Z$ . Pour ce faire, on va passer du repère global de la pièce  $(xyz)$  au repère cristallin du matériau  $(XYZ)$  via trois rotations successives  $\alpha$ ,  $\beta$  et  $\gamma$  avec la convention de Runge [Bunge (1965) et Bunge (1982)] (appelée également la convention  $zxz$  [Goldstein et al. (2002)]).

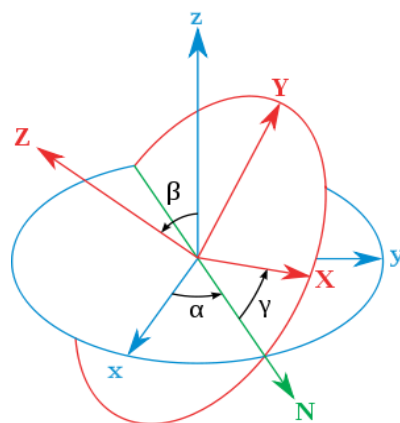


Figure A. 2 : Représentation de l'angle d'Euler avec la convention de Bunge [Bunge (1965) et Bunge (1982)].

Maintenant, on présente une méthode géométrique qui permet d'obtenir les trois angles d'Euler représentant une orientation cristallographique  $X$ - $Y$ - $Z$  exprimé dans le repère global. Les coordonnées de ces 3 vecteurs unitaires peuvent être obtenues par des projections géométriques dans le repère global, on a  $X(X_1, X_2, X_3)$ ,  $Y(Y_1, Y_2, Y_3)$  et  $Z(Z_1, Z_2, Z_3)$ , présentées sur la **Figure A. 3**.

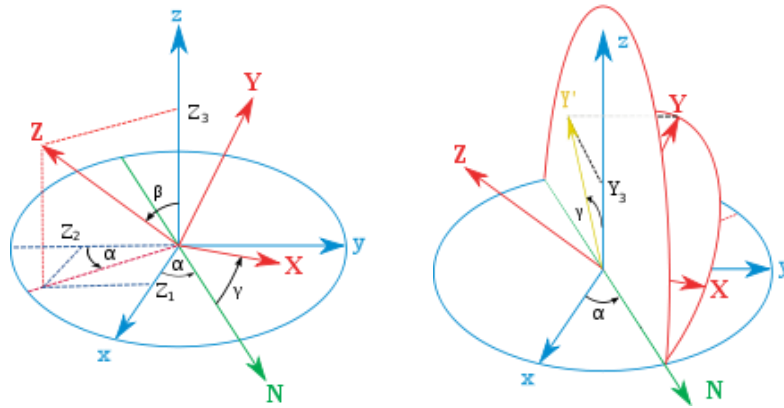


Figure A. 3 : Représentation des projections géométriques dans le repère global.

D'après la méthode géométrique, on peut obtenir :

$$\begin{cases} \alpha = \text{atan2}(Z_1, -Z_2) \\ \beta = \text{acos}(Z_3) \\ \gamma = \text{atan2}(X_3, Y_3) \end{cases}$$

avec  $\text{atan2}(y,x)$  une fonction à deux arguments comme fonction de  $\text{atan}(y/x)$ .

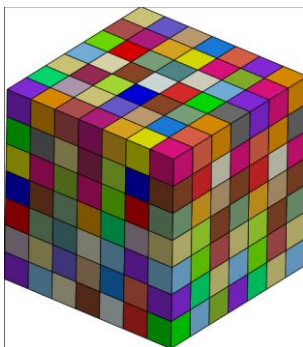
Les 3 angles d'Euler obtenus permettent de fournir la matrice de rotation  $\underline{\underline{R}}$  du repère global au repère cristallin du matériau, sous forme suivante :

$$\underline{\underline{R}} = \begin{bmatrix} c_1 c_3 - c_2 s_1 s_3 & -c_1 s_3 - c_2 c_3 s_1 & s_1 s_2 \\ c_1 c_2 s_3 + c_3 s_1 & c_1 c_2 c_3 - s_1 s_3 & -c_1 s_2 \\ s_2 s_3 & c_3 s_2 & c_2 \end{bmatrix}$$

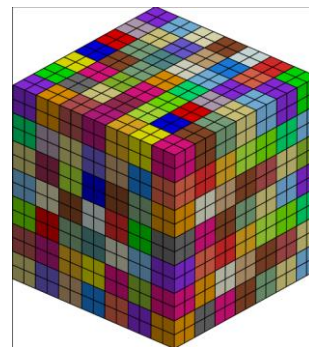
avec  $c_1 = \cos(\alpha)$ ,  $s_1 = \sin(\alpha)$ ,  $c_2 = \cos(\beta)$ ,  $s_2 = \sin(\beta)$ ,  $c_3 = \cos(\gamma)$ ,  $s_3 = \sin(\gamma)$ .

Il est à noter que, avec la convention de Bunge, les notations généralement utilisées pour les angles d'Euler sont  $(\phi_1, \Phi, \phi_2)$ , avec  $\phi_1 = \alpha$ ,  $\Phi = \beta$ ,  $\phi_2 = \gamma$ , ceux qui sont bien appliqués dans le cadre de ma thèse.

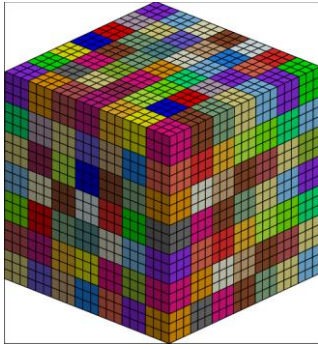
## Annexe I. 9 : Maillages utilisés pour l'étude de convergence



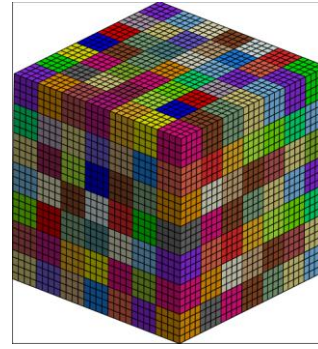
(a) 343 grains avec 1 élément/grain



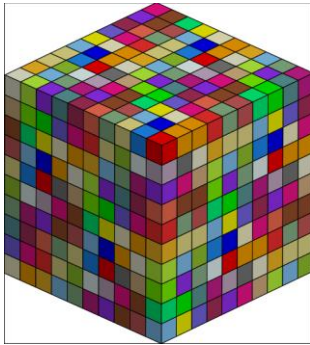
(b) 343 grains avec 8 éléments/grain



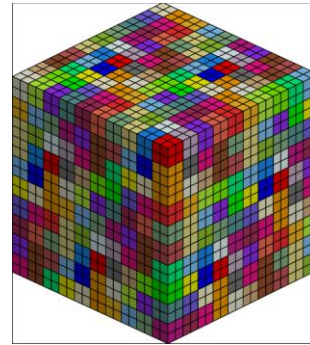
(c) 343 grains avec 27 éléments/grain



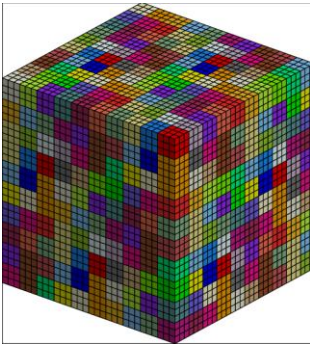
(d) 343 grains avec 64 éléments/grain



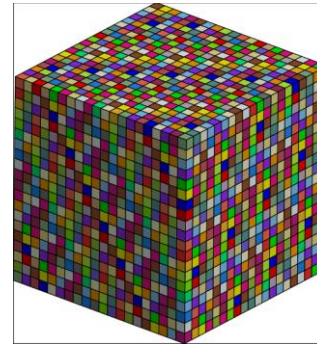
(e) 1000 grains avec 1 élément/grain



(f) 1000 grains avec 8 éléments/grain



(g) 1000 grains avec 27 élément/grain



(h) 8000 grains avec 1 élément/grain

## Annexe I. 10 : Dérivées partielles mises à jour avec l'effet d'avalanche

Ici, on ne présente que les termes différents de ceux présentés dans l'Annexe I. 3, pour les modèles « la racine de la somme » et « la somme des racines ».

❖ Dérivées partielles de  $R_{\gamma^s}$

$$R_{\gamma^s} = \Delta\gamma^s - \Phi(|\tau^s| - \tau_c^s) \text{sign}(\tau^s) \Delta t, \text{ avec } \Phi(x) = \left\langle \frac{x}{K_0} \right\rangle^n$$

- **Dérivée par rapport à  $\Delta\gamma^u$**

$$\frac{\partial R_{\gamma^s}}{\partial \Delta\gamma^u} = \delta_{su} \left( 1 - \Delta t \Phi' \text{sign}(\tau^s) \frac{\tau_a}{\gamma_0} \exp\left(\frac{|\gamma_s|}{\gamma_0}\right) \right)$$

avec  $\Phi'(x) = \frac{n}{K_0} \left\langle \frac{x}{K_0} \right\rangle^{n-1}$ .





# Annexe II : Implémentation numérique du modèle monocristallin poreux

## Annexe II. 1 : Calcul des dérivées partielles des résidus dans le code de calcul ZéBuLoN

Les composantes de la matrice jacobienne correspondantes au modèle monocristallin poreux implémenté dans le code ZéBuLoN sont établies dans cette section. Seuls les termes différents de ceux présentés dans l'Annexe I. 3 complétés par l'Annexe I. 10 en tenant compte de l'effet d'avalanche sont présentés ci-dessous :

❖ **Dérivées partielles de  $R_{\underline{E}}$**

$$R_{\underline{E}} = \Delta \underline{E} - \Delta \underline{F} \cdot \underline{F}^{-1} \underline{E} + \underline{E} \cdot \left( \sum_s \Delta \gamma^s \underline{n}^s \right) (1-f)$$

• **Dérivée par rapport à  $\Delta \underline{E}$**

$$\frac{\partial R_{\underline{E}}}{\partial \Delta \underline{E}} = \underline{1} - (\Delta \underline{F} \cdot \underline{F}^{-1}) \otimes \underline{1} + (1-f) \underline{1} \otimes \left( \sum_s \Delta \gamma^s \underline{n}^s \right)^T + (1-f) (\underline{E} \otimes \underline{1}) : \left( \sum_s \Delta \gamma^s \frac{\partial \underline{n}^s}{\partial \Delta \underline{E}} \right)$$

avec  $\frac{\partial \underline{n}^s}{\partial \Delta \underline{E}} = \frac{\partial \underline{n}^s}{\partial \underline{M}} : \frac{\partial \underline{M}}{\partial \underline{C}^e} : \frac{\partial \underline{C}^e}{\partial \underline{E}} : \frac{\partial \underline{E}}{\partial \Delta \underline{E}}$ , sous-entendu  $\tau^s = \underline{M} : \underline{N}^s$

d'où

$$\frac{\partial \underline{n}^s}{\partial \underline{M}} = \frac{\partial \underline{n}^s}{\partial \underline{\sigma}} = -\frac{1}{H} \frac{\partial Q}{\partial \underline{\sigma}} + \frac{1}{H^2} \left( \frac{\partial H}{\partial \underline{\sigma}} \otimes \underline{Q} \right) = -\frac{1}{H} \frac{\partial Q}{\partial \underline{\sigma}} + \frac{1}{H^2} \left( \frac{\partial Q}{\partial \tau_s^*} \otimes \underline{Q} \right)$$

avec  $\frac{\partial Q}{\partial \underline{\sigma}} = \frac{2}{\tau_s^{*2}} (\underline{N}^s \otimes \underline{N}^s) + \frac{2}{15} \frac{\alpha f}{\tau_s^{*2}} \underline{J} + \frac{1}{30} q_1 q_2^2 f \frac{1}{\tau_s^{*2}} \cosh \left( q_2 \sqrt{\frac{3}{20}} \frac{\sigma_m}{\tau_s^*} \right) (\underline{1} \otimes \underline{1})$

et

$$\frac{\partial Q}{\partial \tau_s^*} = -4 \frac{\tau^s}{\tau_s^{*3}} \underline{N}^s - \frac{4}{15} \frac{\alpha f}{\tau_s^{*3}} \underline{s} - \frac{2}{3} \sqrt{\frac{3}{20}} q_1 q_2 f \left( \frac{1}{\tau_s^{*2}} \sinh \left( q_2 \sqrt{\frac{3}{20}} \frac{\sigma_m}{\tau_s^*} \right) + q_2 \sqrt{\frac{3}{20}} \frac{\sigma_m}{\tau_s^{*3}} \cosh \left( q_2 \sqrt{\frac{3}{20}} \frac{\sigma_m}{\tau_s^*} \right) \right) \underline{1}$$

$$\frac{\partial \underline{\underline{M}}}{\partial \underline{\underline{C}}^e} = \frac{\partial \left[ \underline{\underline{C}}^e \cdot \left( \underline{\underline{\Lambda}}^e : \frac{1}{2} (\underline{\underline{C}}^e - 1) \right) \right]}{\partial \underline{\underline{C}}^e} = \left( \underline{\underline{1}} \otimes \underline{\underline{\Pi}}^{eT} \right) + \left( \underline{\underline{C}}^e \otimes \underline{\underline{1}} \right) : \frac{1}{2} \underline{\underline{\Lambda}}^e = \left( \underline{\underline{1}} \otimes \underline{\underline{\Pi}}^e \right) + \frac{1}{2} \left( \underline{\underline{C}}^e \otimes \underline{\underline{1}} \right) : \underline{\underline{\Lambda}}^e$$

$$\frac{\partial \underline{\underline{C}}^e}{\partial \underline{\underline{E}}} = \frac{\partial (\underline{\underline{E}}^T \cdot \underline{\underline{E}})}{\partial \underline{\underline{E}}} = \frac{\partial E_{mi}}{\partial E_{kl}} E_{mj} + E_{mi} \frac{\partial E_{mj}}{\partial E_{kl}} = \delta_{mk} \delta_{il} E_{mj} + E_{mi} \delta_{mk} \delta_{jl} = \delta_{il} E_{jk}^T + E_{ik}^T \delta_{jl} = \underline{\underline{1}} \otimes \underline{\underline{E}}^T + \underline{\underline{E}}^T \otimes \underline{\underline{1}}$$

$$\frac{\partial \underline{\underline{E}}}{\partial \Delta \underline{\underline{E}}} = \underline{\underline{1}}$$

- **Dérivée par rapport à  $\Delta \gamma^u$**

$$\underline{\underline{\frac{\partial R_{\underline{\underline{E}}}}{\partial \Delta \gamma^u}}} = \underline{\underline{E}} \cdot \underline{\underline{n}}^s \delta_{su}$$

- **Dérivée par rapport à  $\Delta r_D^u$**  : idem

- **Dérivée par rapport à  $\Delta r_L^q$**  : idem

❖ **Dérivées partielles de  $R_{\gamma^s}$**

$$R_{\gamma^s} = \Delta \gamma^s - \Phi(\tau_s^* - \tau_c^s) \Delta t, \text{ avec } \Phi(x) = \left\langle \frac{x}{K_0} \right\rangle^n$$

- **Dérivée par rapport à  $\Delta \underline{\underline{E}}$**

$$\frac{\partial R_{\gamma^s}}{\partial \Delta \underline{\underline{E}}} = \frac{\partial R_{\gamma^s}}{\partial \underline{\underline{M}}} : \frac{\partial \underline{\underline{M}}}{\partial \underline{\underline{C}}^e} : \frac{\partial \underline{\underline{C}}^e}{\partial \underline{\underline{E}}} : \frac{\partial \underline{\underline{E}}}{\partial \Delta \underline{\underline{E}}}$$

D'où,

$$\frac{\partial R_{\gamma^s}}{\partial \underline{\underline{M}}} = -\Delta t \frac{\partial \Phi}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \tau_s^*} \frac{\partial \tau_s^*}{\partial \underline{\underline{M}}} = -\Delta t \frac{\partial \Phi}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \tau_s^*} \frac{\partial \tau_s^*}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} = -\Delta t \Phi' \underline{\underline{n}}^s = -\Delta t \Phi' \underline{\underline{n}}^s$$

$$\text{avec } \Phi'(x) = \frac{n}{K_0} \left\langle \frac{x}{K_0} \right\rangle^{n-1}$$

$$\frac{\partial \underline{\underline{M}}}{\partial \underline{\underline{C}}^e} = \frac{\partial \left[ \underline{\underline{C}}^e \cdot \left( \underline{\underline{\Lambda}}^e : \frac{1}{2} (\underline{\underline{C}}^e - 1) \right) \right]}{\partial \underline{\underline{C}}^e} = \left( \underline{\underline{1}} \otimes \underline{\underline{\Pi}}^{eT} \right) + \left( \underline{\underline{C}}^e \otimes \underline{\underline{1}} \right) : \frac{1}{2} \underline{\underline{\Lambda}}^e = \left( \underline{\underline{1}} \otimes \underline{\underline{\Pi}}^e \right) + \frac{1}{2} \left( \underline{\underline{C}}^e \otimes \underline{\underline{1}} \right) : \underline{\underline{\Lambda}}^e$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial \underline{\underline{C}}^e}{\partial \underline{\underline{E}}} &= \frac{\partial (\underline{\underline{E}}^T \cdot \underline{\underline{E}})}{\partial \underline{\underline{E}}} = \frac{\partial E_{mi}}{\partial E_{kl}} E_{mj} + E_{mi} \frac{\partial E_{mj}}{\partial E_{kl}} = \delta_{mk} \delta_{il} E_{mj} + E_{mi} \delta_{mk} \delta_{jl} = \delta_{il} E_{jk}^T + E_{ik}^T \delta_{jl} \\ &= \underline{\underline{1}} \otimes \underline{\underline{E}}^T + \underline{\underline{E}}^T \otimes \underline{\underline{1}} \\ \frac{\partial \underline{\underline{E}}}{\partial \Delta \underline{\underline{E}}} &= \underline{\underline{1}}\end{aligned}$$

On obtient donc :

$$\frac{\partial R_{\gamma^s}}{\partial \Delta \underline{\underline{E}}} = -\Delta t \Phi' n^s : \left[ (\underline{\underline{1}} \otimes \underline{\underline{\Pi}}^e) + \frac{1}{2} (\underline{\underline{C}}^e \otimes \underline{\underline{1}}) : \underline{\underline{\Lambda}}^e \right] : (\underline{\underline{1}} \otimes \underline{\underline{E}}^T + \underline{\underline{E}}^T \otimes \underline{\underline{1}}), \text{ avec } \Phi'(x) = \frac{n}{K_0} \left\langle \frac{x}{K_0} \right\rangle^{n-1}$$

- **Dérivée par rapport à  $\Delta \gamma^u$**

$$\frac{\partial R_{\gamma^s}}{\partial \Delta \gamma^u} = \delta_{su} \left( 1 - \Delta t \Phi' \frac{\tau_a}{\gamma_0} \exp\left(\frac{|\gamma_s|}{\gamma_0}\right) \right), \text{ avec } \Phi'(x) = \frac{n}{K_0} \left\langle \frac{x}{K_0} \right\rangle^{n-1}$$

- **Dérivée par rapport à  $\Delta r_D^u$**

$$\frac{\partial R_{\gamma^s}}{\partial \Delta r_D^u} = \frac{\partial R_{\gamma^s}}{\partial \tau_c^s} \frac{\partial \tau_c^s}{\partial \Delta r_D^u}$$

D'où,

$$\frac{\partial R_{\gamma^s}}{\partial \tau_c^s} = -\Delta t \frac{\partial \Phi}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \tau_c^s} = -\Delta t \Phi'(-1) = \Delta t \Phi'$$

avec le modèle « racine de la somme » :

$$\frac{\partial \tau_c^s}{\partial \Delta r_D^u} \stackrel{(a)}{=} \frac{\partial \left( \tau_0 + \mu \sqrt{\sum_u^{12} a^{su} r_D^u + \alpha_L^2 \sum_p^4 r_L^p} \right)}{\partial \Delta r_D^u} = \frac{1}{2} \mu a^{su} \left( \sqrt{\sum_u^{12} a^{su} r_D^u + \alpha_L^2 \sum_p^4 r_L^p} \right)^{-1}$$

ou avec le modèle « somme des racines » :

$$\frac{\partial \tau_c^s}{\partial \Delta r_D^u} \stackrel{(b)}{=} \frac{\partial \left( \tau_0 + \mu \left( \sqrt{\sum_u^{12} a^{su} r_D^u} + \alpha_L \sqrt{\sum_p^4 r_L^p} \right) \right)}{\partial \Delta r_D^u} = \frac{1}{2} \mu a^{su} \left( \sqrt{\sum_u^{12} a^{su} r_D^u} \right)^{-1}$$

Donc, on obtient :

$$\frac{\partial R_{\gamma^s}}{\partial \Delta r_D^u} \stackrel{(a)}{=} \frac{1}{2} \Delta t \Phi' \mu a^{su} \left( \sqrt{\sum_u^{12} a^{su} r_D^u + \alpha_L^2 \sum_p^4 r_L^p} \right)^{-1}, \text{ avec } \Phi'(x) = \frac{n}{K_0} \left\langle \frac{x}{K_0} \right\rangle^{n-1}$$

ou

$$\frac{\partial R_{\gamma^s}}{\partial \Delta r_D^u} \stackrel{(b)}{=} \frac{1}{2} \Delta t \Phi' \mu a^{su} \left( \sqrt{\sum_u^{12} a^{su} r_D^u} \right)^{-1}$$

- **Dérivée par rapport à  $\Delta r_L^q$**

$$\frac{\partial R_{\gamma^s}}{\partial \Delta r_L^q} = \frac{\partial R_{\gamma^s}}{\partial \tau_c^s} \frac{\partial \tau_c^s}{\partial \Delta r_L^q}$$

D'où,

$$\frac{\partial R_{\gamma^s}}{\partial \tau_c^s} = -\Delta t \frac{\partial \Phi}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \tau_c^s} = -\Delta t \Phi' (-1) = \Delta t \Phi'$$

avec le modèle « racine de la somme » :

$$\frac{\partial \tau_c^s}{\partial \Delta r_L^q} \stackrel{(a)}{=} \frac{\partial \left( \tau_0 + \mu \sqrt{\sum_u^{12} a^{su} r_D^u + \alpha_L^2 \sum_p^4 r_L^p} \right)}{\partial \Delta r_L^q} = \frac{1}{2} \mu \alpha_L^2 \left( \sqrt{\sum_u^{12} a^{su} r_D^u + \alpha_L^2 \sum_p^4 r_L^p} \right)^{-1}$$

ou avec le modèle « somme des racines » :

$$\frac{\partial \tau_c^s}{\partial \Delta r_L^q} \stackrel{(b)}{=} \frac{\partial \left( \tau_0 + \mu \sqrt{\sum_u^{12} a^{su} r_D^u} + \alpha_L \sqrt{\sum_p^4 r_L^p} \right)}{\partial \Delta r_L^q} = \frac{1}{2} \mu \alpha_L \left( \sqrt{\sum_p^4 r_L^p} \right)^{-1}$$

Enfin, on obtient :

$$\frac{\partial R_{\gamma^s}}{\partial \Delta r_L^q} \stackrel{(a)}{=} \frac{1}{2} \Delta t \Phi' \mu \alpha_L^2 \left( \sqrt{\sum_u^{12} a^{su} r_D^u + \alpha_L^2 \sum_p^4 r_L^p} \right)^{-1}, \text{ avec } \Phi'(x) = \frac{n}{K_0} \left\langle \frac{x}{K_0} \right\rangle^{n-1}$$

ou

$$\frac{\partial R_{\gamma^s}}{\partial \Delta r_L^q} \stackrel{(b)}{=} \frac{1}{2} \Delta t \Phi' \mu \alpha_L \left( \sqrt{\sum_p^4 r_L^p} \right)^{-1}$$

### ❖ Dérivées partielles de $R_{r_D^s}$

avec le modèle « racine de la somme » :

$$R_{r_D^s} \stackrel{(a)}{=} \Delta r_D^s - \Delta \gamma^s \left( \frac{\sqrt{\sum_u b^{su} (r_{D_t}^u + \Delta r_{D_t}^u) + K_{dl} \sum_p r_L^p}}{\kappa} - G_c (r_{D_t}^s + \Delta r_{D_t}^s) \right)$$

ou avec le modèle « somme des racines » :

$$R_{r_D^s}^{(b)} = \Delta r_D^s - \Delta \gamma^s \left( \frac{\sqrt{\sum_u b^{su} (r_{D_t}^u + \Delta r_{D_t}^u)} + K_{dl} \sqrt{\sum_p r_L^p}}{\kappa} - G_c (r_{D_t}^s + \Delta r_{D_t}^s) \right)$$

- **Dérivée par rapport à  $\Delta E$**  : idem

- **Dérivée par rapport à  $\Delta \gamma^u$**

$$\frac{\partial R_{r_D^s}^{(a)}}{\partial \Delta \gamma^u} = -\delta_{su} \left( \frac{\sqrt{\sum_u b^{su} r_D^u + K_{dl} \sum_p r_L^p}}{\kappa} - G_c r_D^s \right)$$

ou

$$\frac{\partial R_{r_D^s}^{(b)}}{\partial \Delta \gamma^u} = -\delta_{su} \left( \frac{\sqrt{\sum_u b^{su} r_D^u + K_{dl} \sqrt{\sum_p r_L^p}}}{\kappa} - G_c r_D^s \right)$$

- **Dérivée par rapport à  $\Delta r_D^u$**

$$\frac{\partial R_{r_D^s}^{(a)}}{\partial \Delta r_D^u} = \delta_{su} - \Delta \gamma^s \left( \frac{1}{2\kappa} b^{su} \left( \sum_u b^{su} r_D^u + K_{dl} \sum_p r_L^p \right)^{\frac{1}{2}} - G_c \delta_{su} \right)$$

ou

$$\frac{\partial R_{r_D^s}^{(b)}}{\partial \Delta r_D^u} = \delta_{su} - \Delta \gamma^s \left( \frac{1}{2\kappa} b^{su} \left( \sum_u b^{su} r_D^u \right)^{\frac{1}{2}} - G_c \delta_{su} \right)$$

- **Dérivée par rapport à  $\Delta r_L^q$**

$$\frac{\partial R_{r_D^s}^{(a)}}{\partial \Delta r_L^q} = -\Delta \gamma^s \left( \frac{1}{2\kappa} K_{dl} \left( \sum_u b^{su} r_D^u + K_{dl} \sum_p r_L^p \right)^{\frac{1}{2}} \right)$$

ou

$$\frac{\partial R_{r_D^s}^{(b)}}{\partial \Delta r_L^q} = -\Delta \gamma^s \frac{1}{2\kappa} \left( \frac{K_{dl}}{\sum_p r_L^p} \right)^{\frac{1}{2}}$$

❖ Dérivées partielles de  $R_{r_L^p}$

$$R_{r_L^p} = \Delta r_L^p + A_L (r_{L_t}^p + \Delta r_{L_t}^p - r_L^{sat}) \left( \sum_{s \in \text{plan}(p)}^3 \Delta \gamma^s \right) \left( \sum_{s \in \text{plan}(p)}^3 (r_{D_t}^s + \Delta r_{D_t}^s) \right)$$

- Dérivée par rapport à  $\Delta \underline{E}$  : idem

- Dérivée par rapport à  $\Delta \gamma^u$

$$\frac{\partial R_{r_L^p}}{\partial \Delta \gamma^u} = A_L (r_L^p - r_L^{sat}) \left( \sum_{u \in \text{plan}(p)}^3 r_D^u \right), \text{ si } u \in p$$

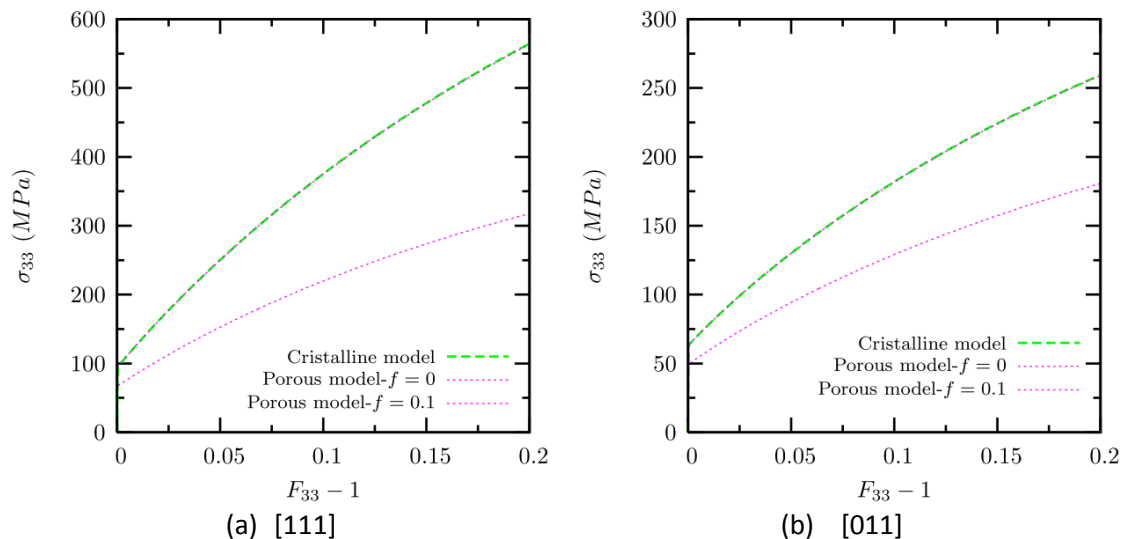
- Dérivée par rapport à  $\Delta r_D^u$

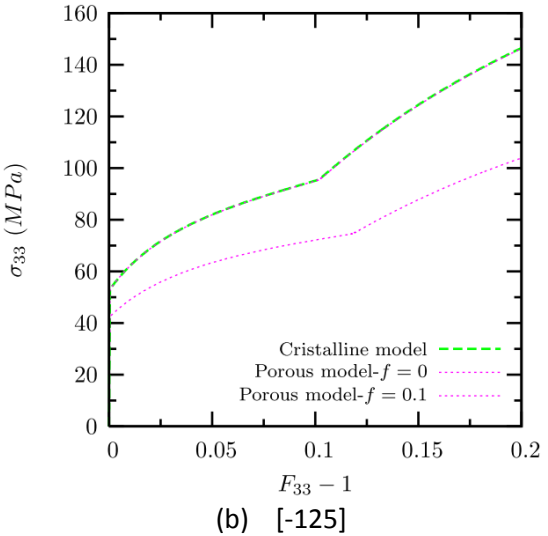
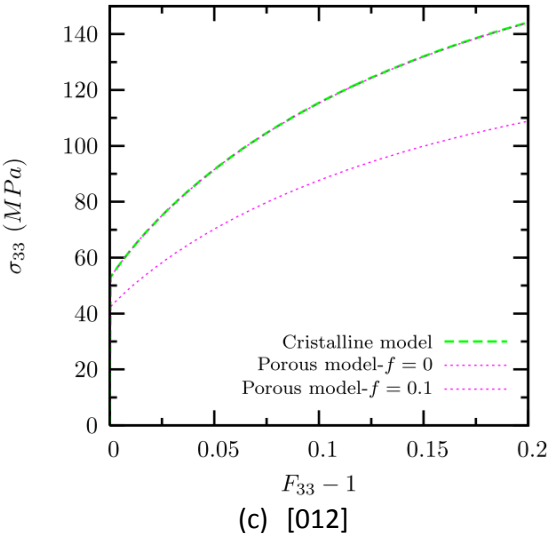
$$\frac{\partial R_{r_L^p}}{\partial \Delta r_D^u} = A_L (r_L^p - r_L^{sat}) \left( \sum_{u \in \text{plan}(p)}^3 \Delta \gamma^u \right), \text{ si } u \in p$$

- Dérivée par rapport à  $\Delta r_L^q$

$$\frac{\partial R_{r_L^p}}{\partial \Delta r_L^q} = \delta_{pq} \left( 1 + A_L \left( \sum_{s \in \text{plan}(p)}^3 \Delta \gamma^s \right) \left( \sum_{s \in \text{plan}(p)}^3 (r_D^s) \right) \right)$$

## Annexe II. 2 : Tests simples du modèle monocristallin poreux sur un élément fini pour différentes directions de traction









## Modélisation de la fragilisation due au gonflement dans les aciers inoxydables austénitiques irradiés

**RESUME :** Au cours d'une irradiation neutronique à long-terme dans les Réacteurs à Eau Pressurisée (REPs), une modification importante du comportement mécanique des matériaux utilisés dans les internes de cuve (composés des aciers inoxydables austénitiques de la série 300) est observée, y compris un durcissement et un adoucissement induit par irradiation, une perte de la ductilité et de la ténacité. Jusqu'à présent, beaucoup d'efforts ont été contribués pour identifier les effets d'irradiation sur l'évolution microstructurale du matériau (dislocations, boucles de Frank, cavités, ségrégation, etc.). Le gonflement induit par irradiation, considéré comme un facteur limitant la durée de fonctionnement des réacteurs, pourrait modifier les propriétés mécaniques des matériaux (plasticité, ténacité, etc), même conduire à une distorsion des structures du fait des modifications dimensionnelles entre les différentes composantes.

L'objectif principal de ce travail de thèse est d'étudier qualitativement l'influence de l'effet du gonflement sur le comportement mécanique des matériaux irradiés. Un modèle micromécanique constitutif en grandes déformations basé sur les évolutions de la densité de dislocations et de défauts d'irradiation (boucles de Frank) est développé et implémenté dans les codes de calcul éléments finis ZéBuLoN et Cast3M. Les simulations numériques sont réalisées pour calculer les propriétés mécaniques d'un agrégat polycristallin. Par ailleurs, la technique d'homogénéisation est appliquée pour développer un modèle de type Gurson. Les simulations d'une cellule poreuse sont utilisées pour étudier le comportement mécanique des monocristaux poreux, en tenant compte des différents effets de la triaxialité, de la porosité et de l'orientation cristallographique, afin d'étudier l'effet de la présence des cavités sur la plasticité et la rugosité du matériau irradié à l'échelle polycristallin.

**Mots clés :** aciers inoxydables austénitiques, structure CFC, effets d'irradiation, modèle micro-mécanique, plasticité cristalline, approche variationnelle, critère de plasticité, monocristal poreux.

### Modeling of cavity swelling-induced embrittlement in irradiated austenitic stainless steels

**ABSTRACT:** During long-time neutron irradiation occurred in Pressurized Water Reactors (PWRs), significant changes of the mechanical behavior of materials used in reactor core internals (made of 300 series austenitic stainless steels) are observed, including irradiation-induced hardening and softening, loss of ductility and toughness. So far, much effect has been made to identify radiation effects on material microstructure evolution (dislocations, Frank loops, cavities, segregation, etc.). The irradiation-induced cavity swelling, considered as a potential factor limiting the reactor lifetime, could change the mechanical properties of materials (plasticity, toughness, etc.), even lead to a structure distortion because of the dimensional modifications between different components.

The principal aim of the present PhD work is to study qualitatively the influence of cavity swelling on the mechanical behaviors of irradiated materials. A micromechanical constitutive model based on dislocation and irradiation defect (Frank loops) density evolution has been developed and implemented into ZéBuLoN and Cast3M finite element codes to adapt the large deformation framework. 3D FE analysis is performed to compute the mechanical properties of a polycrystalline aggregate. Furthermore, homogenization technique is applied to develop a Gurson-type model. Unit cell simulations are used to study the mechanical behavior of porous single crystals, by accounting for various effects of stress triaxiality, of void volume fraction and of crystallographic orientation, in order to study void effect on the irradiated material plasticity and roughness at polycrystalline scale.

**Keywords:** austenitic stainless steel, FCC structure, radiation effects, micromechanical modeling, crystalline plasticity, variational approach, yield criterion, porous single crystal.