

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 apparaît 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 apparaître 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)	ν	b_D (Å)	b_L (Å)	μ (GPa)
330	173	0.32	2.54	2.08	66
C_{11} (GPa)	C_{12} (GPa)	C_{44} (GPa)	n	K_0 (MPa.s ^{1/n})	
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**.

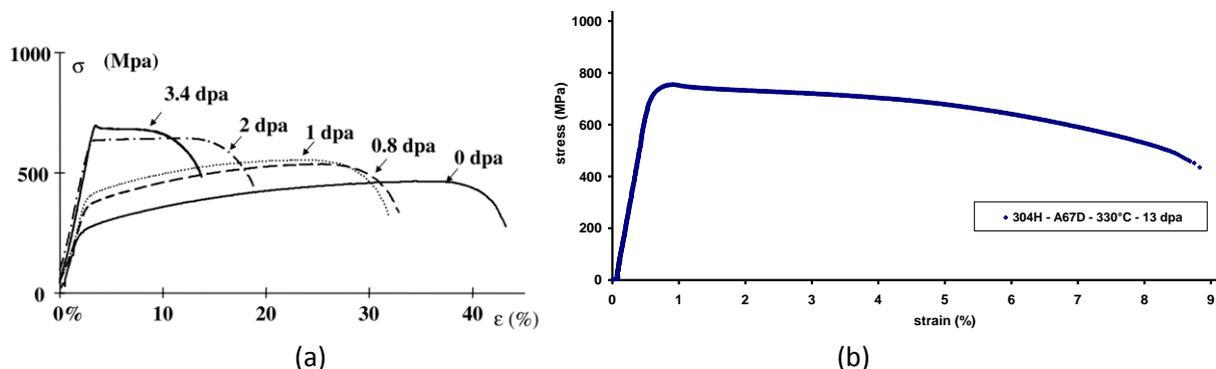


Figure 3.1 : Courbes de traction expérimentales pour un acier 304L Hyp irradié à différentes doses dans le réacteur OSIRIS, avant la correction du module d'Young. La vitesse de déformation est $3 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$. Les températures d'irradiation et d'essai sont 330°C. (a) données à 0, 0.8,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

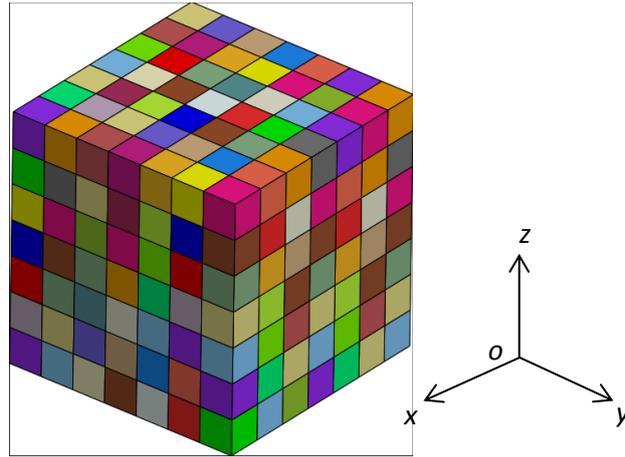


Figure 3.2 : Maillage d'agrégat polycristallin simplifié avec 343 grains cubiques et 1 élément par grain.

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

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 (ϕ_1, Φ, ϕ_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_{ϕ_1} , r_Φ et r_{ϕ_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 associés sont obtenus à partir de l'agrégat polycristallin pour calculer la déformation et la contrainte conventionnelles.

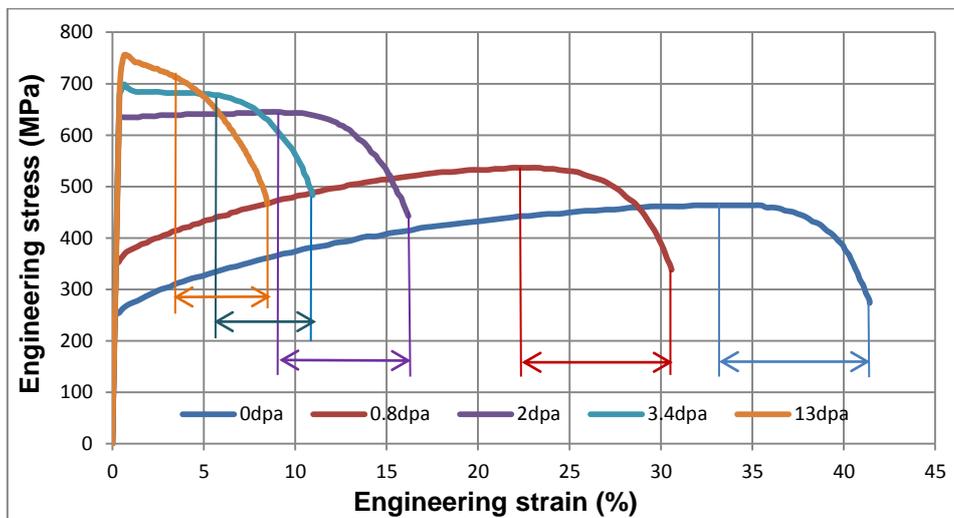


Figure 3.3 : Courbes de traction pour les matériaux non-irradié et irradiés à différentes doses, après la correction du module d'Young. La partie enlevée de chaque courbe est indiquée sur la figure.

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 (par système s)	5.38e-11	4.54e-11	3.66e-11	2.97e-11	1.03e-11
r_{L}^p (par plan p)	-	2.29e-6	4.72e-6	5.04e-6	4.9e-6
ϕ_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 τ_0 , G_c , et κ . 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 τ_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.

τ_0 (MPa)	G_c	κ
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 $3 \cdot 10^{-4} \text{s}^{-1}$ sont reportées sur la **Figure 3.4**. Deux calculs numériques supplémentaires sont réalisés pour une vitesse de $3 \cdot 10^{-3} \text{s}^{-1}$ et $3 \cdot 10^{-5} \text{s}^{-1}$, 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.

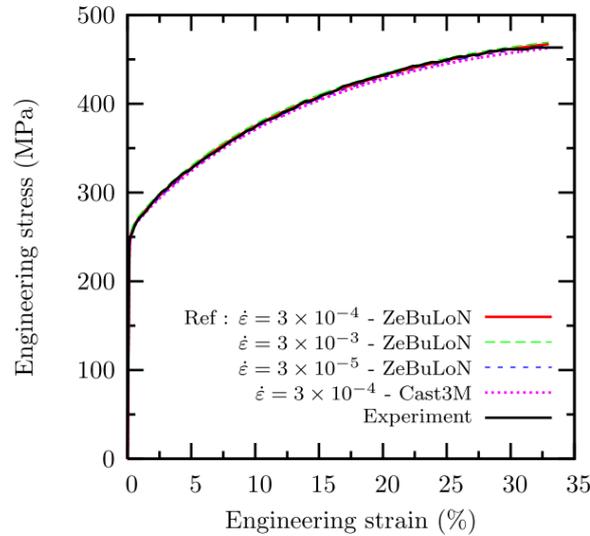


Figure 3.4 : Courbes de traction conventionnelles obtenues par l'expérience et par les calculs numériques à différentes vitesses de déformation macroscopique pour l'acier 304L non-irradié.

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'écrouissage 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.

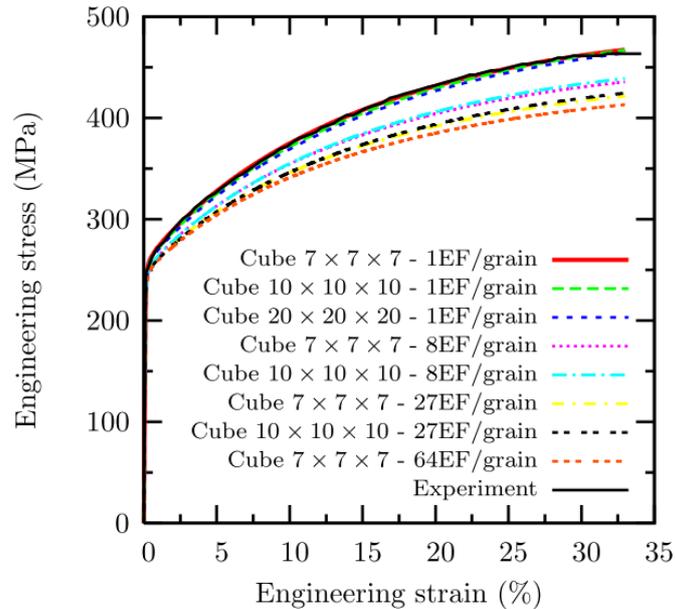


Figure 3.5 : Etude de convergence pour l'état non-irradié, réalisée avec les différents maillages présentés dans le **Tableau 3.6**.

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 : α_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 α_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 ϕ_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 α_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 α_L constant pour toutes les doses ne permet pas de retrouver les bonnes limites d'élasticité. La dépendance apparente du paramètre α_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 (α_L, K_{dl} et A_b) constant.

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

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

	0.8dpa	2dpa	13dpa
r_L^p	2.8e-7	3.4e-6	7.1e-6
(ρ_L^p en 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
(ρ_L^{sat} en m^{-3})	(1.0 * ρ_L^p)	(0.81 * ρ_L^p)	(0.42 * ρ_L^p)
r_L^p (référence)	2.29e-6	4.72e-6	4.9e-6
(ρ_L^p en 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.

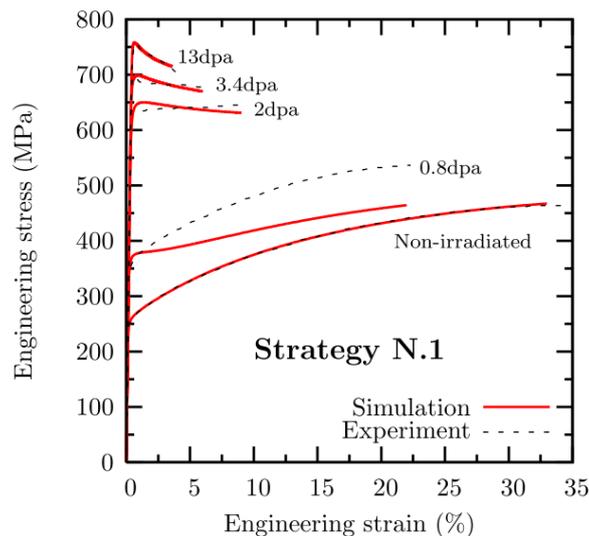


Figure 3.6 : Stratégie 1 : courbes de traction expérimentales et simulées pour les matériaux non-irradié et irradiés à différentes doses.

Analyse des résultats pour la stratégie 1 :

En supposant que le paramètre α_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 α_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.* ≥ 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 τ_a la cission nécessaire dépendante de la dose pour débloquer les dislocations et γ_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 τ_a et γ_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 ≥ 2 dpa) où les amas de défauts ponctuels sont assez nombreux pour ancrer les lignes de dislocations.

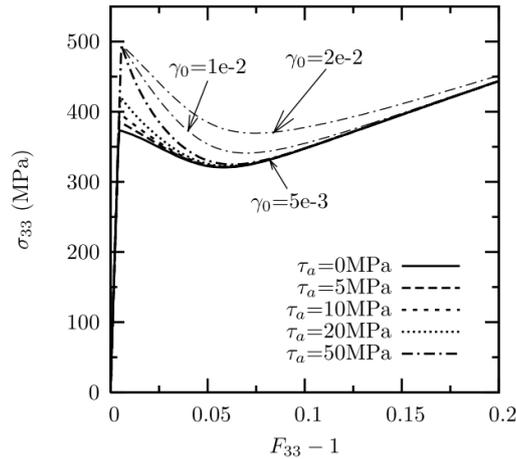


Figure 3.7 : Analyse des paramètres τ_a et γ_0 dans le modèle cristallin.

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 α_L pour chaque dose. D’après l’analyse des paramètres τ_a et γ_0 , τ_a dépend de la dose et est seulement présent pour les fortes doses. γ_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**.

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

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

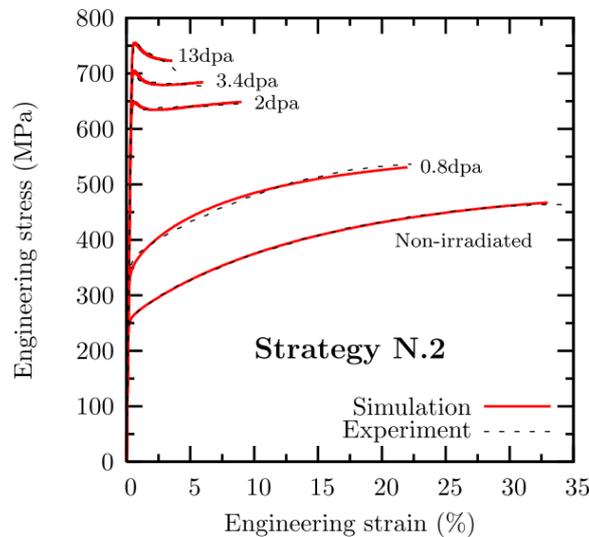


Figure 3.8 : Stratégie 2 : courbes de traction expérimentales et simulées pour les matériaux non-irradié et irradiés à différentes doses.

Analyse des résultats pour la stratégie 2 :

Dans la stratégie 2, le paramètre α_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 α_L augmente avec la dose ;
- Les valeurs des paramètres r_L^{sat} et τ_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'écroissage 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 (≈ 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 hypereffort, les taux d'écroutissage 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'écroutissage diminue dès une très faible dose de 0.01dpa [Trinkaus 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 γ_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**.

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

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

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

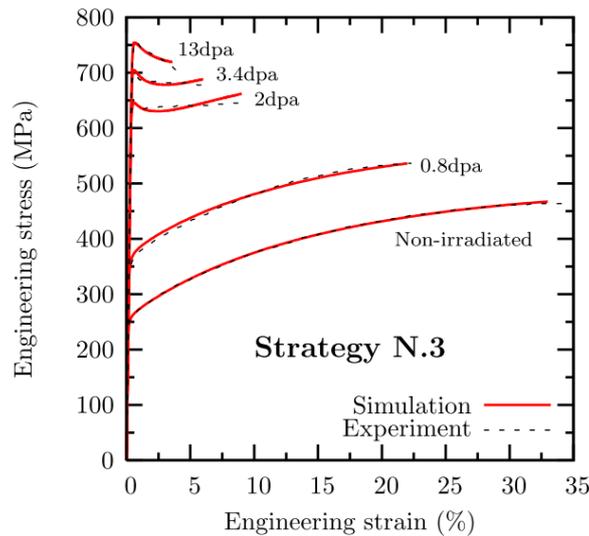


Figure 3.9 : Stratégie 3 : courbes de traction expérimentales et simulées pour les matériaux non-irradié et irradiés à différentes doses.

Analyse des résultats pour la stratégie 3 :

Dans cette stratégie, le paramètre α_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 α_L et τ_a augmentent avec la dose. La valeur de τ_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.

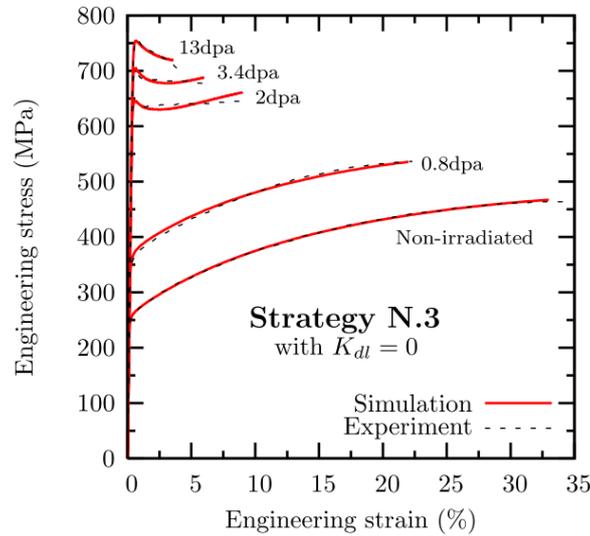


Figure 3.10 : Courbes de traction expérimentales et simulées pour les matériaux non-irradié et irradiés à différentes doses, en posant le paramètre $K_{dl} = 0$.

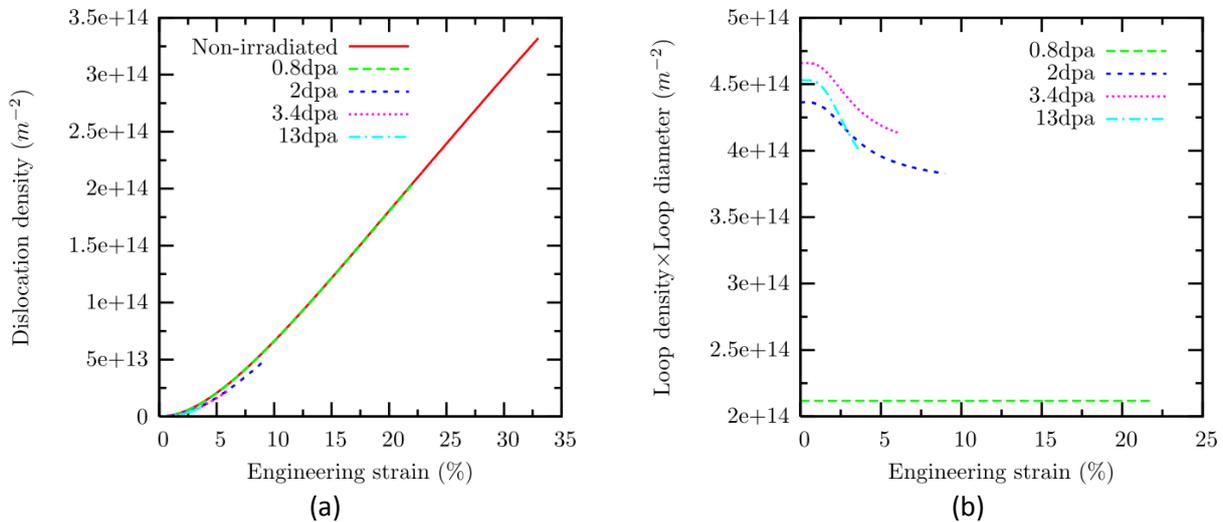


Figure 3.11 : L'évolution de la densité totale de : (a) dislocations, (b) boucles de Frank, en fonction de la déformation macroscopique pour différentes doses.

Etat	ρ_{Dini} (m^{-2})	ρ_{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**.

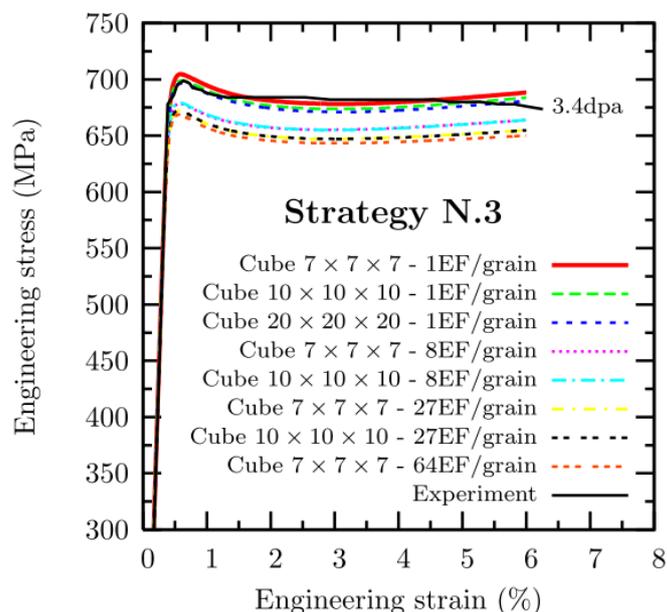


Figure 3.12 : Etude de convergence pour l'état irradié, réalisée avec différents maillages présentés dans le **Tableau 3.6**.

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'écroutissement 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**.

	0.8dpa	2dpa	3.4dpa	13dpa
α_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.

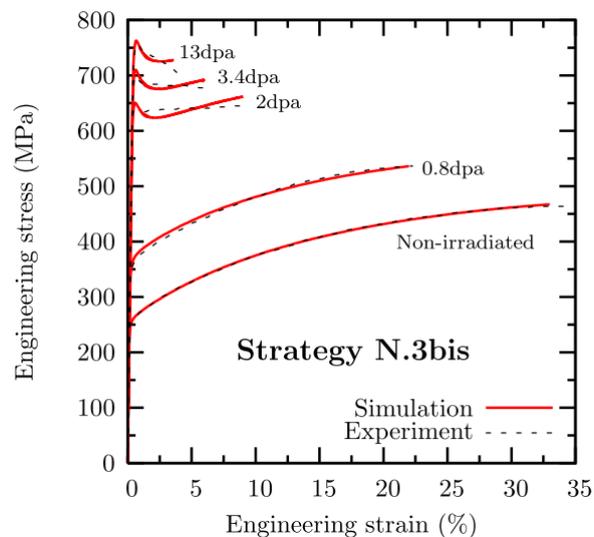


Figure 3.13 : Stratégie 3bis : courbes de traction expérimentales et simulées pour les matériaux non irradiés et irradiés à différentes doses.

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 α_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.

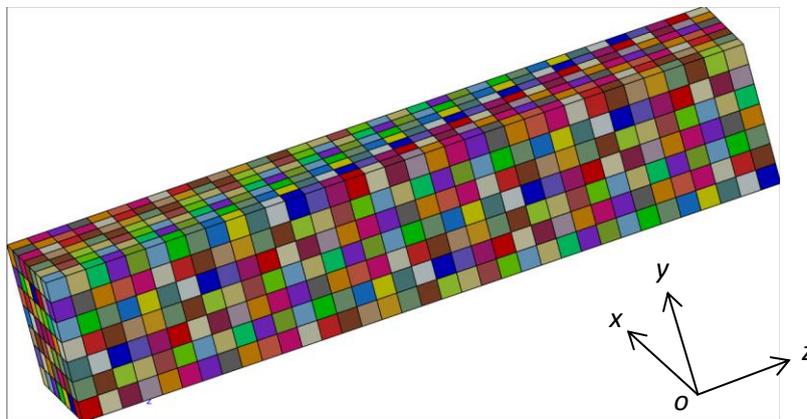


Figure 3.14 : Maillage d'agrégat polycristallin simplifiée sous forme de poutre avec 1715 (7x7x35) grains cubiques aléatoires et un élément par grain. Nombre de degrés de liberté total est égal à 25728.

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

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.

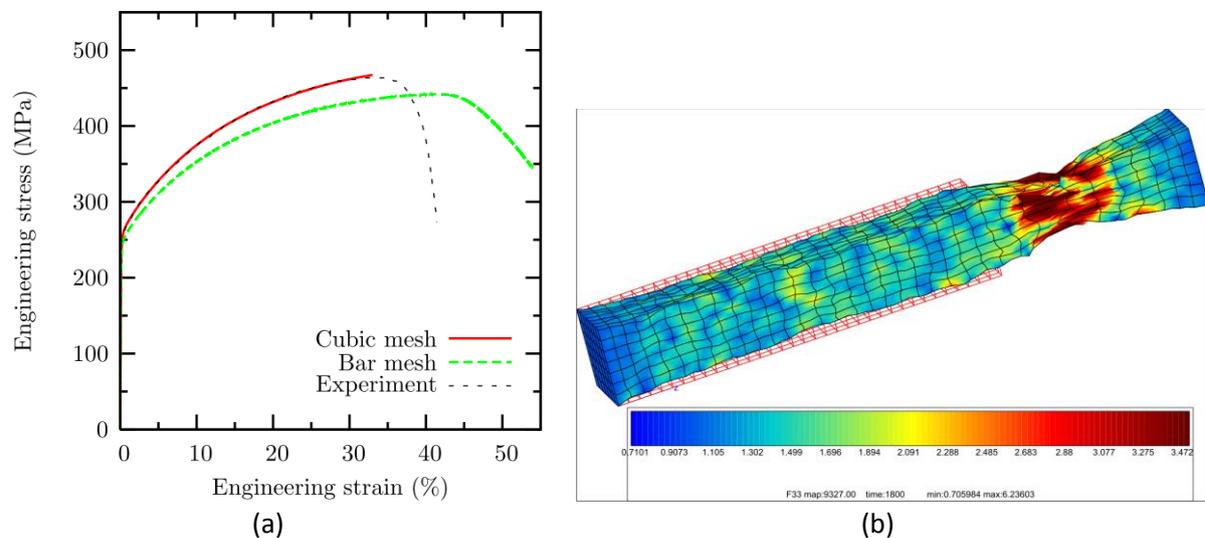


Figure 3.15 : Calcul de structure avec les paramètres de la loi cristalline identifiés pour le matériau non-irradié. (a) courbe de traction obtenue par le calcul de structure (en vert), avec la courbe de traction expérimentale (en noir) et celle obtenue à partir de l'identification sur l'agrégat polycristallin 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'écroutissage 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.

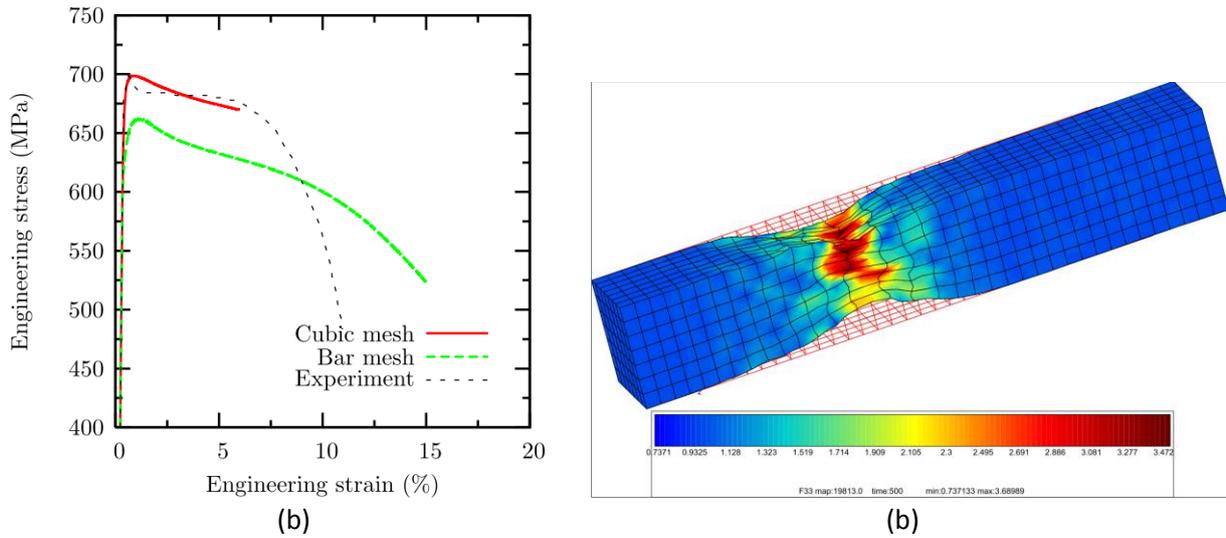


Figure 3.16 : Calcul de structure avec les paramètres de la loi cristalline identifiés pour le matériau irradié à 3.4dpa dans la stratégie 1. (a) courbe de traction obtenue par le calcul de structure (en vert), avec la courbe de traction expérimentale (en noir) et celle obtenue à partir de l'identification 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%.

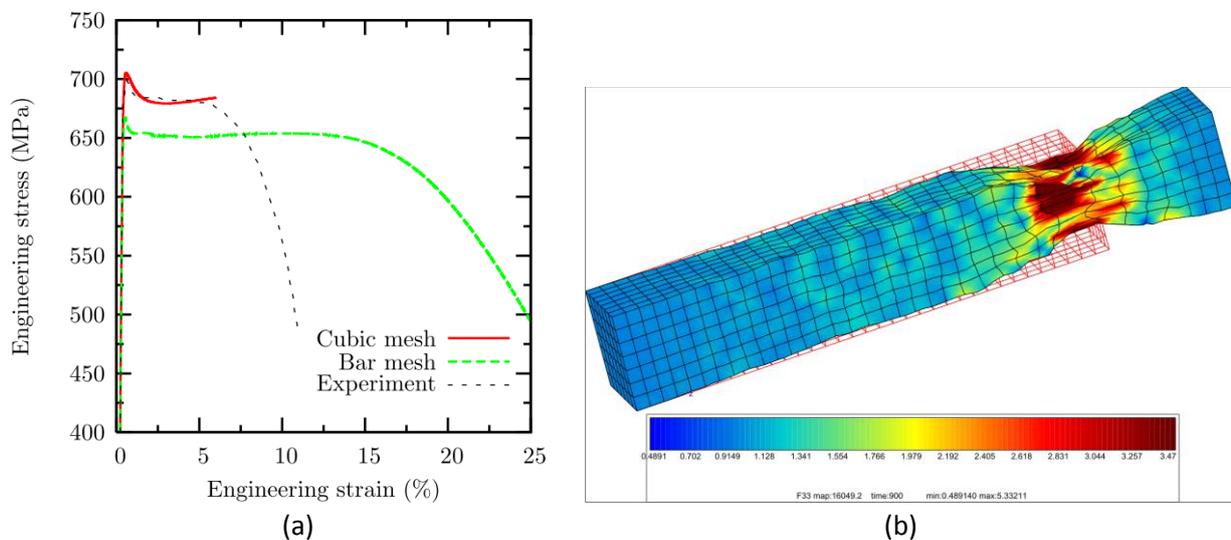


Figure 3.17 : Calcul de structure avec les paramètres de la loi cristalline identifiés pour le matériau irradié à 3.4dpa dans la stratégie 2. (a) courbe de traction obtenue par le calcul de structure (en vert), avec la courbe de traction expérimentale (en noir) et celle obtenue à partir de l'identification 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%.

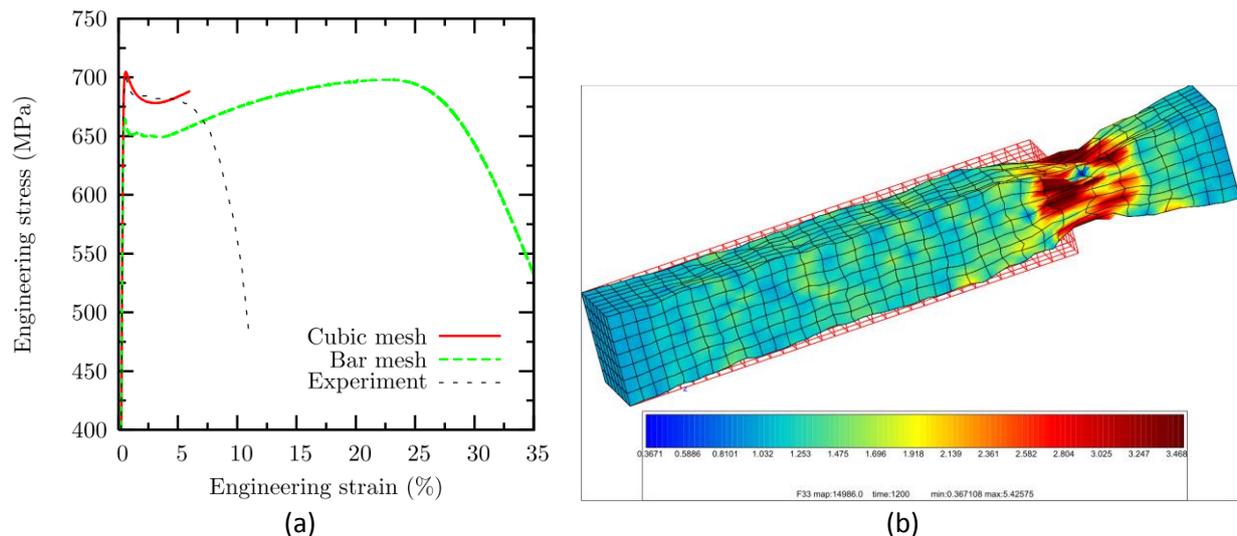


Figure 3.18 : Calcul de structure avec les paramètres de la loi cristalline identifiés pour le matériau irradié à 3.4dpa dans la stratégie 3. (a) courbe de traction obtenue par le calcul de structure (en vert), avec la courbe de traction expérimentale (en noir) et celle obtenue à partir de l'identification 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.* ≥ 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 τ_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 γ_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.