



**HAL**  
open science

# Modélisation de l'évolution microstructurale des matériaux métalliques en conditions extrêmes

Benoit Dabas

► **To cite this version:**

Benoit Dabas. Modélisation de l'évolution microstructurale des matériaux métalliques en conditions extrêmes. Science des matériaux [cond-mat.mtrl-sci]. Sorbonne Université, 2022. Français. NNT : 2022SORUS106 . tel-03773616

**HAL Id: tel-03773616**

**<https://theses.hal.science/tel-03773616v1>**

Submitted on 9 Sep 2022

**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.



SORBONNE  
UNIVERSITÉ

# THÈSE DE DOCTORAT

Pour l'obtention du grade de

**Docteur de Sorbonne Université**

École doctorale 397 : Physique et chimie des matériaux

## Modélisation de l'évolution microstructurale des matériaux métalliques en conditions extrêmes

**Benoît DABAS**

Directeur de thèse : **Alphonse FINEL**

Co-directeur de thèse : **Thomas JOURDAN**

Co-encadrants de thèse : **Antoine RUFFINI, Yann LE BOUAR**

Thèse soutenue le 10 juin 2022 devant un jury composé de :

<b>Helena ZAPOLSKY</b>	Professeur des Universités, GPM, Rouen	Président
<b>Ludovic THUINET</b>	Maître de Conférences, UMET, Lille	Rapporteur
<b>Christophe DENOUAL</b>	Ingénieur de Recherche, CEA/DAM, Arpajon	Rapporteur
<b>Silvère AKAMATSU</b>	Directeur de Recherche, INSP, Paris	Examineur
<b>Laurent DUPUY</b>	Ingénieur de Recherche, CEA/SRMA, Gif-sur-Yvette	Examineur
<b>Yann LE BOUAR</b>	Directeur de Recherche, LEM, Châtillon	Co-encadrant de thèse
<b>Antoine RUFFINI</b>	Ingénieur de Recherche, LEM, Châtillon	Co-encadrant de thèse
<b>Thomas JOURDAN</b>	Directeur de Recherche, CEA/SRMP, Gif-sur-Yvette	Co-directeur de thèse
<b>Alphonse FINEL</b>	Directeur de Recherche, LEM, Châtillon	Directeur de thèse



---

*À ma chère et tendre femme, Camille.*

*Per aspera ad astra.*





## REMERCIEMENTS

Ma thèse a été financée par l'ONERA et le CEA et est issue d'une collaboration entre le Laboratoire d'Étude des Microstructures (LEM) et le Service de Recherches de Métallurgie Physique (SRMP). Je remercie le CEA et l'ONERA pour leur soutien financier. Je remercie également Jean-Luc Béchade et Alphonse Finel puis Mathieu Fèvre de m'avoir accueilli au sein de leurs laboratoires, le SRMP et le LEM respectivement.

Je remercie tous les membres de mon jury de thèse d'avoir accepté de juger de mes travaux de thèse. Merci d'avoir pris le temps de lire mon manuscrit. Merci également pour vos remarques et vos questions, qui ont donné lieu à d'enrichissantes discussions. Après trois années de thèse sans une conférence en présentiel, cela m'a fait très plaisir de pouvoir discuter scientifiquement de mes résultats de thèse avec une assemblée en chair et en os. Un grand merci d'avoir exprimé votre enthousiasme à l'égard de mes travaux, tant oralement pendant et à l'issue de la soutenance, que par écrit dans le procès verbal de soutenance et dans vos rapports.

Je souhaite remercier du fond du cœur ma direction et mon encadrement de thèse : Alphonse, Thomas, Yann et Antoine. Merci à vous quatre d'avoir pris soin de moi durant ces années. Ce fut un réel plaisir de travailler sous votre direction, aidé de vos conseils. Merci de m'avoir tant appris, d'avoir consolidé en moi le goût pour la physique, la belle physique. Merci pour la richesse de nos échanges. Merci d'avoir toujours eu pour moi une oreille attentive et gardé votre porte ouverte à mes questions, si naïves soient-elles. Merci d'avoir toujours eu confiance en moi, même lorsque les limites de rendu étaient largement dépassées. Merci d'avoir suivi mon rythme de rédaction qui, j'en suis bien conscient, s'apparente à un Dirac centré sur la date limite de rendu. Je remercie tout particulièrement Antoine, qui, malgré les différences dans nos méthodes de travail et malgré un contexte compliqué, a toujours donné le maximum pour moi et avec la même application que pour tout autre projet. Merci Thomas, d'avoir été si prompt à relire mes travaux de thèse et à me donner des corrections détaillées, alors même que ton cœur de métier n'était pas le champ de phase. Merci pour ton accueil bienveillant au SRMP et pour

---

tous tes conseils. Merci Yann pour tes mots d'encouragement après chaque rendu de chapitre durant la rédaction. De petites attentions mais qui font si chaud au cœur. Un grand merci enfin à Alphonse qui, malgré le contexte compliqué, m'a toujours consacré le temps qu'il fallait pour que je comprenne la physique. Merci Alphonse, pour ton soutien sans faille, sur lequel je me suis si souvent appuyé, notamment lors de mes différends avec l'École Doctorale. Je me suis lancé dans cette thèse par goût scientifique et sûr de l'excellence de mon encadrement dans ce domaine certes, mais aussi et surtout en connaissant les qualités humaines de celui-ci. Les presque quatre années de thèse qui viennent de s'achever m'ont confirmé que j'avais eu raison. Merci de m'avoir accepté tel que je suis, sans jugement, alors même que je me suis marié, puis ai eu deux enfants durant ma thèse, évènement peu commun pour un thésard. Vos mots à l'occasion de ma soutenance m'ont beaucoup touché, ainsi que l'attention que vous avez pu avoir envers ma femme. Merci en particulier d'avoir salué son travail de l'ombre. Je retiendrai de ces belles années votre excellence scientifique et votre application à transmettre. Je retiendrai également et surtout votre accompagnement humain et nos échanges sur des sujets plus personnels, tout aussi riches que nos échanges scientifiques.

Je souhaite également remercier les nombreuses personnes que j'ai pu côtoyer au cours de ma thèse, au premier rang desquelles les personnels du LEM. Merci à vous tous pour ces années d'échanges. De très belles années, riches scientifiquement bien sûr mais également et surtout humainement. Si l'on finit par s'attacher à ces grands murs en béton des années 30, c'est avant tout pour les personnes qui sont à l'intérieur. Merci pour votre accueil chaleureux lorsque je suis arrivé, jeune stagiaire, il y a 5 ans déjà (Matthieu était en thèse, Juba commençait la sienne rendez-vous compte!). Chaleur qui a continué d'animer nos échanges durant ma thèse. Je regretterai l'esprit rieur et léger qui rythmait nos pauses, participant à l'ambiance détendue qui amène le bon équilibre entre travail et détente. L'esprit facétieux et créatif de Fred me manquera, les conseils salvateurs de Jean-Seb également. Je garderai en mémoire nos belles sorties en forêt Matteo et Luis, ou encore nos pauses café Matthieu. Merci Juba pour tes précieux conseils dans le code et le post-traitement des résultats. Merci de m'avoir supporté dans le même bureau alors que tu étais en pleine rédaction. Je me rends compte à présent de la difficulté que t'imposait ma présence et nos discussions alors qu'il fallait que tu avances. Merci Benoît pour toutes tes astuces qui m'ont permis de réaliser ce beau manuscrit et ces belles planches de présentation beamer. Merci pour toutes les discussions que nous avons pu avoir, alors que nous étions dans le même bureau. Merci Amandine et Armelle, pour nos discussions sur nos enfants, ou encore sur nos parents et grands-parents. Merci Étienne pour nos discussions sur l'urgence climatique. Merci Luis et Étienne d'avoir fait en sorte que nous puissions tous terminer ensemble. Cela faisait toujours chaud au cœur de vous voir en salle café et de pouvoir me libérer avec vous de toutes les inquiétudes et pressions qui pèsent sur un thésard en fin de rédaction. Merci enfin Godefroy, pour ces quelques mois de franches rigolades en fin de thèse. Bon courage pour la tienne et profite en bien! Merci à tous, doctorants, stagiaires et permanents, dont j'ai croisé la route durant ma thèse. Merci Lorenzo pour ces grandes parties de Catan et autres Pandemic. Mention spéciale à Henri et à notre belle grille de mots croisés Libé, qui nous a tenu en haleine un mois durant. Merci pour vos mots et cadeaux, à l'occasion de ma soutenance, qui m'ont beaucoup touché. Merci pour vos attentions au long de ces années. Félicitations à Luis et bon courage pour les derniers mètres à parcourir pour Étienne. Bonne continuation à tous et merci encore!

---

Je souhaite remercier ensuite l'ensemble des personnels du SRMP, mon autre terre d'accueil. Merci en particulier à Jean-Luc de m'avoir si bien accueilli. Merci d'avoir montré tant d'enthousiasme pour ma thèse, alors que les outils numériques auxquels elle faisait appel n'étaient pas ceux que le SRMP avait l'habitude d'utiliser. Merci Patricia, puis Rosabelle, de m'avoir aidé dans mes nombreuses démarches – déclarations de congés paternité, arrêt maladie – sans jamais montrer de lassitude à mon égard. Je garderai en mémoire nos discussions animées autour de sujet variés en salle café. J'ai également une pensée pour Claire Berthier, qui m'a accompagné de si nombreuses fois sur le chemin du car retour et qui nous a désormais quittés. Merci à Clovis, compagnon de la première heure, pour ces nombreuses pauses café et ces parties de Catan à la maison. Merci pour nos discussions et tes encouragements alors que tu terminais ton manuscrit tandis que je commençais à peine le mien. Merci Orane pour toutes nos sorties en forêt et nos grandes discussions. Ce fut un plaisir de partager ces années avec vous, Quentin, Océane et tous ceux dont j'oublie les noms.

Je souhaite enfin remercier ma famille et mes amis, qui, jusqu'à ma soutenance, m'ont accompagné. Romain, Sterenn, Louis, Baptiste... J'ai été très touché que vous preniez pour moi votre après-midi voire votre journée pour assister à ma soutenance. Merci Claire et Laurent de m'avoir invité à déjeuner un dimanche de rédaction de thèse. J'ai été très touché que vous ayez pensé à moi, alors seul à Paris. Merci Henri pour nos bières, DSA et Dus pour nos foots du lundi matin. Merci Gauthier T. pour notre amitié. Merci Gauthier D. pour cette Saint-Lyon qui a inauguré d'une belle manière ma rédaction. Merci à tous ceux que je ne cite pas ici mais qui m'ont soutenu de leur amitié tout au long de ma thèse. Merci à mes parents qui m'ont donné le goût des sciences et inculqué le le goût de l'effort et du travail bien fait. Merci Jérôme de m'avoir aidé dans la résolution de mes équations et d'avoir répondu à mes longs appels en fin de thèse. Merci Claire, fidèle compagnon de trajet.

Un immense merci enfin à mon infatigable travailleuse de l'ombre, à celle qui a veillé sur moi durant ces années, qui tant sacrifié pour ma thèse. Un immense merci ma Camille, ma chère et tendre femme. Tant de choses sont advenues durant cette thèse. Notre mariage, la naissance de Joseph, celle de Faustine. Merci ma Camille d'avoir accepté de me suivre dans cette aventure et plus généralement dans celle du mariage. C'est une grande joie et je trouve dans notre engagement un véritable soutien.

Merci à tous ceux qui ont, de près ou de loin, contribué à la réussite de cette thèse et que je n'ai pas cités. *À Dieu vat!*



# TABLE DES MATIÈRES

<b>Remerciements</b>	<b>iv</b>
<b>Notations</b>	<b>1</b>
<b>Introduction générale</b>	<b>1</b>
<b>1 État de l'art et choix d'une méthode de simulation</b>	<b>7</b>
1.1 Dynamique d'Amas et Méthodes Monte-Carlo Cinétiques sur Objets ou Évènements .	8
1.2 La Dynamique des Dislocations Discrètes . . . . .	11
1.3 Éléments Finis . . . . .	13
1.4 Le formalisme champ de phase . . . . .	14
1.5 Conclusion . . . . .	23
<b>2 Modèle champ de phase couplant lacunes, cavités et dislocations</b>	<b>25</b>
2.1 Définition du modèle champ de phase continu . . . . .	26
2.2 Implémentation numérique . . . . .	38
2.3 Conclusion . . . . .	44
<b>3 Étude et validation du modèle sur des configurations modèles</b>	<b>45</b>
3.1 Étude de l'interaction d'un pore avec un champ de lacunes . . . . .	46
3.2 Étude de la montée de dislocation . . . . .	64
3.3 Conclusion . . . . .	71
<b>4 Simulations en conditions expérimentales</b>	<b>75</b>
4.1 Recuit de cavités dans l'Aluminium après irradiation . . . . .	76
4.2 Pistes pour l'étude de l'évolution de pores de tailles micrométriques sous contrainte et en présence de dislocations . . . . .	106

---

4.3 Conclusion . . . . .	107
<b>Conclusion &amp; Perspectives</b>	<b>108</b>
<b>Annexes</b>	<b>111</b>
A Relations entre paramètres champ de phase et grandeurs physiques . . . . .	113
B Paramètres des matériaux étudiés . . . . .	117
C Choix des paramètres numériques pour la fermeture de pore . . . . .	119
D Choix des paramètres numériques pour la montée de dislocations . . . . .	123
E Variation du pas de temps $\Delta t$ en fonction des autres paramètres . . . . .	125
F Méthode de régression polynomiale . . . . .	127
<b>Bibliographie</b>	<b>128</b>

# NOTATIONS

---

<b>Cavité</b>		
$L_\eta$	mobilité	$[\text{m}^3.\text{J}^{-1}.\text{s}^{-1}]$
$w_p$	largeur de l'interface	[m]
$\gamma_p$	énergie de surface	$[\text{J}.\text{m}^{-2}]$
<b>Boucle de dislocation</b>		
$L_\phi$	mobilité	$[\text{m}^2.\text{J}^{-1}.\text{s}^{-1}]$
$w_d$	largeur du cœur	[m]
$\Gamma_d$	énergie de cœur	$[\text{J}.\text{m}^{-1}]$
$\xi^{0,d}$	déformation propre	
<b>Lacunes</b>		
$M$	mobilité	$[\text{m}^5.\text{J}^{-1}.\text{s}^{-1}]$
$c_0$	concentration d'équilibre dans la matrice	
$\xi^{0,v}$	déformation propre	
<b>Élasticité</b>		
$\underline{\underline{C}}$	tenseur des rigidités	[Pa]
$\underline{\underline{\sigma}}$	tenseur des contraintes	[Pa]
$\underline{\underline{\sigma}}^A$	tenseur des contraintes appliquées	[Pa]
$\underline{\underline{\epsilon}}$	tenseur des déformations	
$\underline{\underline{\epsilon}}^0$	tenseur des déformations propres	

---





# INTRODUCTION GÉNÉRALE

Les propriétés physiques des matériaux métalliques résultent de l'évolution couplée de leur microstructure et des nombreux défauts qui les composent (cavités, dislocations, lacunes, interstitiels...). C'est pourquoi la compréhension des mécanismes qui régissent la nucléation et l'évolution de ces défauts est essentielle pour comprendre et prédire les caractéristiques mécaniques de ces matériaux. Dans un environnement extrême, mêlant haute température, haute pression et irradiation, cette compréhension est d'autant plus cruciale qu'elle permet de garantir l'intégrité physique des matériaux. Les enjeux sont particulièrement importants lorsque les domaines d'application considérés relèvent de secteurs industriels stratégiques comme le nucléaire ou l'aéronautique.

Pour autant, c'est justement lorsque les conditions de température, de pression ou d'irradiation sont extrêmes que les mécanismes physiques à l'œuvre sont les plus difficiles à isoler et à décrire. Les températures élevées activent ainsi la mobilité des lacunes et permettent la montée des dislocations en plus de leur glissement, favorisée par des contraintes élevées. Sous irradiation, en plus des lacunes, les auto-interstitiels participent aussi à la cinétique. Ils sont tous les deux en concentration bien plus élevés qu'en condition de vieillissement thermique. Des irradiations à fort taux de dommages créent par exemple des lacunes et des interstitiels en concentrations élevées, jusqu'à 15 ordres de grandeurs supérieurs aux concentrations fixées par l'équilibre thermodynamique. La richesse de ces couplages multi-physiques fait intervenir plusieurs échelles de temps, allant de  $10^{-14}$  secondes pour les cascades de déplacements atomiques sous irradiation à des années pour le vieillissement [Domain et Becquart, 2020], en passant par les heures de recuits à haute température nécessaire dans le cadre du Pressage Isostatique à Chaud (HIP) par exemple [Fullagar *et al.*, 1996].

Afin de pouvoir étudier les phases de vie des matériaux métalliques en conditions extrêmes, déterminantes dans le dimensionnement des systèmes qu'ils composent, la communauté scientifique a développé de nombreuses approches. Les observations expérimentales constituent bien entendu l'une des approches possibles. Les développements réalisés en microscopie électronique permettent aujour-

d'hui d'observer *in situ* la formation de cavités sous irradiation [Bhattacharya *et al.*, 2016, 2018; Gentils *et Cabet*, 2019]. Ces observations sont déterminantes dans la compréhension du gonflement des matériaux sous irradiation (voir figure 1).

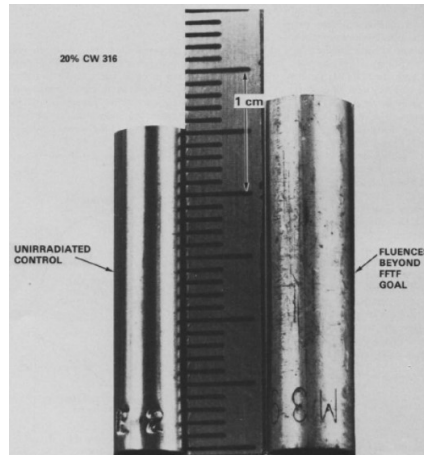


FIGURE 1 – Gonflement d'un acier AISI 316 trempé après irradiation aux neutrons à 75 dpa et à 783 K [Straalsund *et al.*, 1982].

Lorsque les observations *in situ* ne sont pas possibles, il est alors possible de figer la microstructure à différents temps choisis de manière à l'étudier *post-mortem* et à reconstruire la suite des événements. C'est le choix qui a été fait dans l'étude du HIP pour le CMSX-4 par exemple [Epishin *et al.*, 2013a, 2014], où la température élevée imposée durant le processus ne permet pas de réaliser des observations *in situ*. Des clichés de microstructures de l'alliage CMSX-4 sous HIP sont montrés figure 2.

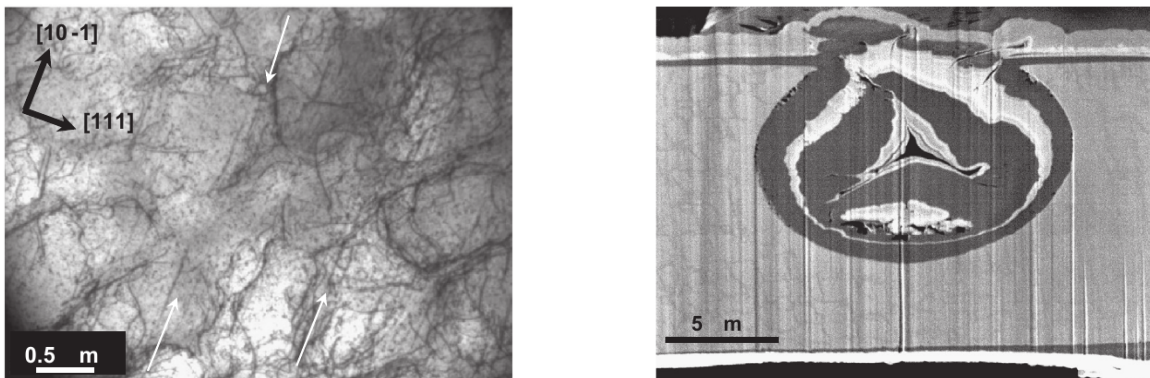


FIGURE 2 – CMSX-4 près HIP à 1288°C/103 MPa/0.5 h. Observations réalisées par Microscopie Électronique en Transmission (TEM). L'image de gauche montre un pore et l'image de droite montre les dislocations présentes dans la microstructure [Epishin *et al.*, 2013a].

Les observations expérimentales ne permettent cependant pas de comprendre à elles seules les phénomènes physiques complexes en jeu. Un dialogue doit alors être établi entre des simulations numériques, limitées par le nombre de paramètres et le nombre de phénomènes dont elles peuvent rendre compte (directement ou indirectement), et le domaine expérimental, qui rend compte, par ses observations, de la richesse des couplages multi-physiques sous-jacents. Les simulations numériques per-

mettent d'isoler les uns des autres les phénomènes en jeu et retenus dans la modélisation. L'influence maîtrisée de chaque paramètre permet de quantifier l'importance de chaque mécanisme élémentaire dans le processus global. Des échelles de temps allant de la vibration des atomes au vieillissement des microstructures peuvent être abordées. Les observations expérimentales apportent les données physiques d'entrée et offrent aux modèles numériques une situation réelle à laquelle se comparer.

Les travaux présentés dans cette thèse s'inscrivent dans la volonté de comprendre le comportement des matériaux métalliques en conditions extrêmes, par le biais de la simulation numérique. Nous avons ainsi construit un modèle numérique en champ de phase pour étudier les interactions entre cavités, montées de dislocations et lacunes.

Dans le **chapitre 1**, nous présentons les différentes méthodes de simulation qui existent et qui permettent, chacune à son échelle et avec ses limitations, de simuler les couplages multi-physiques que nous souhaitons étudier. Nous concluons en justifiant le choix de la méthode champ de phase.

Dans le **chapitre 2**, nous détaillons la construction du modèle en champ de phase. La prise en compte de l'évolution de cavités, de la montée de dislocations et des interactions par diffusion de lacunes y est décrite, le tout dans un cadre thermodynamique cohérent. L'élasticité est prise en compte. Nous détaillons aussi bien la construction que l'implémentation numérique, essentielle pour maîtriser les coûts de calculs. Nous détaillons en particulier notre approche originale de la résolution de l'équilibre chimique qui nous permet de simuler des phénomènes mésoscopiques sur les temps longs de la diffusion.

Dans le **chapitre 3**, nous étudions l'influence des paramètres de notre modèle. Nous nous focalisons dans un premier temps sur la décroissance d'une cavité par diffusion de lacunes puis dans un second sur temps la montée de dislocations. Nous construisons pour cela des cadres d'études pour lesquels nous déduisons, dans chacune des situations, une formule analytique de l'évolution de la microstructure. Nous détaillons l'obtention de formules analytiques auxquelles nous comparons les prédictions numériques de notre modèle. Nous arrivons au terme de ce chapitre à maîtriser l'ensemble des paramètres de notre modèle dans les deux situations étudiées (décroissance de cavité et montée de dislocations).

Dans le **chapitre 4**, nous simulons des situations d'intérêt qui ont fait l'objet d'études expérimentales et pour lesquelles les mécanismes physiques à l'œuvre ne sont pas encore bien compris. Nous réalisons des simulations impliquant l'évolution de cavités, la montée de dislocations, le tout par diffusion de lacunes. Nous montrons l'intérêt et la richesse de la modélisation champ de phase concernant l'étude de ces couplages complexes par rapport à d'autres approches auxquelles nous nous comparons. Nous étudions le comportement d'une microstructure 2D comportant plusieurs cavités et des dislocations. Nous montrons notamment que la prise en compte des interactions élastiques entre les cavités et des dislocations, généralement négligées dans ce type d'étude, modifie significativement la cinétique d'évolution de la microstructure comparé au cas où seule la diffusion est considérée. Nous émettons enfin des pistes pour la simulation de l'évolution de pores sous HIP.



## CHAPITRE

# 1

## ÉTAT DE L'ART ET CHOIX D'UNE MÉTHODE DE SIMULATION

### Sommaire

---

<b>1.1</b>	<b>Dynamique d'Amas et Méthodes Monte-Carlo Cinétiques sur Objets ou Évènements</b>	<b>8</b>
1.1.1	Dynamique d'Amas	8
1.1.2	Monte-Carlo Cinétique sur Objets ou Évènements	10
<b>1.2</b>	<b>La Dynamique des Dislocations Discrètes</b>	<b>11</b>
<b>1.3</b>	<b>Éléments Finis</b>	<b>13</b>
<b>1.4</b>	<b>Le formalisme champ de phase</b>	<b>14</b>
1.4.1	Exemple d'un modèle champ de phase à un champ	16
1.4.2	Cavités, lacunes et dislocations en champ de phase	17
<b>1.5</b>	<b>Conclusion</b>	<b>23</b>

---

Pour répondre aux objectifs donnés en introduction, nous allons passer en revue les différentes méthodes de simulation qui s'offrent à nous. Après une présentation détaillée, nous présenterons des résultats qui nous ont semblé d'intérêt dans le cadre de ces travaux de thèse. Nous concluerons enfin par le choix justifié d'une méthode.

## 1.1 Dynamique d'Amas et Méthodes Monte-Carlo Cinétiques sur Objets ou Évènements

Nous détaillons dans cette partie deux méthodes de simulation complémentaires et particulièrement utilisées dans l'étude des matériaux irradiés : la dynamique d'Amas et les méthodes de Monte Carlo Cinétiques sur Évènements ou Objets (EKMC et OKMC respectivement) [Jourdan, 2016, 2020; Balbuena *et al.*, 2018; Domain et Becquart, 2020]. Alimentées par des données généralement issues de simulations atomistiques, ces méthodes sont capables de prédire la nucléation et la croissance de cavités et de boucles de dislocation [Ortiz *et al.*, 2007; Xu *et al.*, 2012; Moll *et al.*, 2013]. Ces méthodes sont adaptées à des simulations à des échelles mésoscopiques. Les échelles de temps simulées peuvent aller jusqu'à l'année, notamment dans le cadre de vieillissement de matériaux irradiés [Clouet *et al.*, 2005; Jourdan *et al.*, 2010]. Tous ces avantages en font des méthodes de choix dans le cadre de nos travaux de thèse.

### 1.1.1 Dynamique d'Amas

La dynamique d'amas est une approche en champ moyen dans laquelle seule l'évolution des concentrations d'amas est considérée. Prenons le cas de la formation de cavités dans une microstructure caractérisée par une concentration en lacunes  $c_1$ . Dans son formalisme le plus simple, celui de la précipitation homogène d'une seconde phase par condensation de monomères, les équations qui régissent l'évolution des amas sont celles d'un processus de naissance et de mort entre classes d'amas ( $n$ ). La figure 1.1 illustre schématiquement ce processus. Dans le cas de la formation de cavités par diffusion de

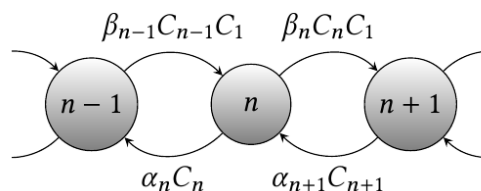


FIGURE 1.1 – Représentation schématique d'un processus de naissance et de mort entre amas, expression de la dynamique d'amas dans son formalisme le plus simple. Schéma tiré de Jourdan [2016].

lacunes, ces amas vont de la lacune (monomère), à la cavité vue comme agrégat de  $n$  lacunes (amas de classe  $n$ ). Toutes les classes intermédiaires (bilacune, trilacune etc.) sont également prises en compte

dans le formalisme dont nous explicitons ci-après les équations :

$$\frac{dc_n}{dt} = J_{n-1,n} - J_{n,n+1}; \quad (1.1)$$

$$\frac{dc_1}{dt} = -2J_{1,2} - \sum_{n \geq 2} J_{n,n+1}; \quad (1.2)$$

avec

$$J_{n,n+1} = \beta_n c_n c_1 - \alpha_{n+1} c_{n+1}. \quad (1.3)$$

où  $c_n$  est la concentration des amas de  $n$  monomères,  $\beta_n$  est le coefficient d'absorption d'un monomère et  $\alpha_n$  est le coefficient d'émission (voir [figure 1.1](#)).  $J_{n,n+1}$  est le flux d'amas entre les classes ( $n$ ) et ( $n+1$ ), dû uniquement à la mobilité des monomères. Dans le cas d'un gaz d'amas dilué, la détermination des coefficients  $\alpha_n$  se fait en écrivant qu'à l'équilibre, le flux entre classes d'amas doit s'annuler. L'expression des coefficients  $\alpha_n$  est alors la suivante :

$$\alpha_{n+1} = \frac{\beta_n}{\Omega} \exp\left(-\frac{F_1 + F_n - F_{n+1}}{k_B T}\right) \quad (1.4)$$

où  $\Omega$  est le volume atomique et  $F_n$  l'énergie libre de l'amas de taille  $n$ . Cette énergie est considérée comme intrinsèque à l'amas. Sa détermination joue un rôle crucial dans les prédictions du modèle. Notons que si l'équation (1.4) est uniquement valable dans le cas de gaz d'amas dilué, des travaux ont été menés pour généraliser la dynamique d'amas aux cas concentrés [[Lepinoux, 2006, 2009](#); [Berthier et al., 2010](#)]. Les coefficients absorption  $\beta_n$  portent dans leur expression divers ingrédients physiques. Ils peuvent dépendre de la forme des amas, de la présence d'interactions à longue portée entre l'amas et le monomère, élastiques ou électrostatiques, de la présence d'une barrière pour l'association de deux amas proches, de la possibilité de recombinaison entre lacunes et interstitiels, de la présence de sources [[Nichols, 1978](#); [Brailsford et Bullough, 1981](#); [Kotomin et Kuzovkov, 1992](#); [Waite, 1958](#); [Schroeder et Dettmann, 1975](#); [Brailsford et al., 1979](#)]. Ils sont déduits du flux de monomères vers l'amas, après résolution de l'équation de diffusion, généralement en régime stationnaire. Selon le phénomène physique que l'on cherche à décrire, l'expression exacte des  $\beta_n$  peut avoir une influence plus ou moins importante sur les résultats obtenus [[Jourdan et al., 2010](#); [Clouet et al., 2005](#); [Jourdan, 2015](#)]. Dans le cas d'une cavité sphérique de rayon  $R_n$  dans une microstructure où le mouvement des lacunes est décrit par une marche aléatoire sans barrière de dernier saut et où  $c(r \rightarrow \infty) = c_1$ , nous obtenons l'expression de  $\beta_n$  suivante :

$$\beta_n = 4\pi R_n D_1 \quad (1.5)$$

où  $D_1$  est le coefficient de diffusion des lacunes. Les équations (1.1) à (1.3) ne prennent en compte qu'une seule espèce chimique. Le formalisme simple que nous venons de décrire peut cependant être facilement généralisé au cas d'amas contenant plusieurs type d'espèces [[Reiss, 1950](#)] et au cas d'amas d'amas mobiles pour  $n > 1$  [[Mirolid et Binder, 1977](#)].

Nous venons de décrire les aspects théoriques de la dynamique d'amas dans son formalisme le plus simple. La mise en place numérique de ce formalisme devient très lourde dès que la taille de la



cavité augmente. Prenons l'exemple d'une cavité sphérique de 10 nm (taille typique d'amas observé sous irradiation [Jacquelin, 2018]). Dans le fer, celle-ci contient de l'ordre de  $10^5$  lacunes, soit autant d'équations à traiter pour simuler la formation de cette cavité. En complexifiant les systèmes étudiés, le nombre d'équations à traiter peut facilement monter à  $10^{13}$  [Jourdan, 2016], ce qui dépasserait ce qu'il est possible de résoudre numériquement. Afin de réduire le nombre d'équations à résoudre, des approximations existent. Lorsque la taille des amas devient assez grande, un regroupement d'amas en classes d'amas est par exemple possible [Golubov *et al.*, 2001; Ghoniem et Sharafat, 1980].

La dynamique d'amas est une méthode au formalisme simple, basé sur l'expression de phénomènes physiques élémentaires. En ce sens elle constitue un cadre de travail attractif, où la compréhension des phénomènes physiques en jeu est facilitée. Pourvu que les paramètres d'entrée soient correctement sélectionnés, cette méthode de simulation permet de caractériser des phénomènes physiques complexes comme des situations sous irradiations. Elle est également capable de simuler de longs temps physiques. Elle suppose cependant que le système reste localement homogène. Enfin, la dynamique d'amas ne décrit pas la répartition spatiale des objets considérés. Les méthodes OKMC et EKMC peuvent justement constituer en ce sens une alternative intéressante par rapport à la dynamique d'amas ou même la compléter.

### 1.1.2 Monte-Carlo Cinétique sur Objets ou Évènements

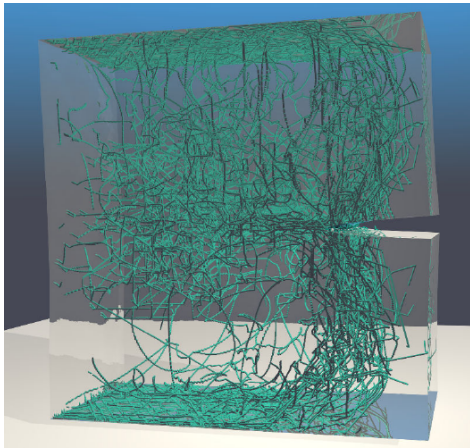
Les méthodes de Monte-Carlo Cinétiques sur Objets [Domain *et al.*, 2004] et sur Évènement [Lanore, 1974] considèrent également la microstructure comme un gaz d'amas. Il s'agit de méthodes stochastiques utilisées pour simuler une suite d'évènements selon un processus de Markov [Voter, 2007], ie pour lesquels la mémoire des évènements passés n'a pas d'influence sur l'avenir. Pour un état donné, ces méthodes considèrent les différentes possibilités d'évolution pour la microstructure selon leur probabilité d'occurrence [Lanore, 1974; Bortz *et al.*, 1975; Gillespie, 1976]. Concrètement, ce sont les fréquences de saut des différents amas (OKMC) ou leur coefficient de diffusion (EKMC) qui gouvernent l'évolution du système. Dans les deux cas, les résultats obtenus sont très similaires [Barbu *et al.*, 2005]. Par rapport à la dynamique d'amas, la position des différents amas est prise en compte. Les corrélations spatiales entre amas sont donc naturellement prises en compte. L'O/EKMC est très flexible. En effet, pourvu qu'on arrive à définir l'amas (fréquence de saut ou coefficient de diffusion), des mécanismes complexes peuvent être étudiés. La variété des espèces et des amas qui peuvent être simulés est également importante [Domain et Becquart, 2020]. Plusieurs difficultés demeurent cependant dans leur utilisation [Jourdan, 2016; Carpentier, 2018] :

- La nécessité de définir des amas limite ces méthodes à des cas relativement dilués.
- Les couplages de flux entre espèces chimiques et auto-défauts, qui dépendent de manière fine des fréquences de sauts atomiques, ne peuvent pas être pris en compte. Cette limite, liée à la description en amas, est également vraie pour la dynamique d'amas.
- Les taux de dissociation sont plus difficiles à définir qu'en dynamique d'amas [Jourdan, 2021].
- Les temps de simulation accessibles sont plus faibles qu'en dynamique d'amas, au maximum de l'ordre de l'heure. Associés à ces temps de simulation, les échelles d'espaces sont également

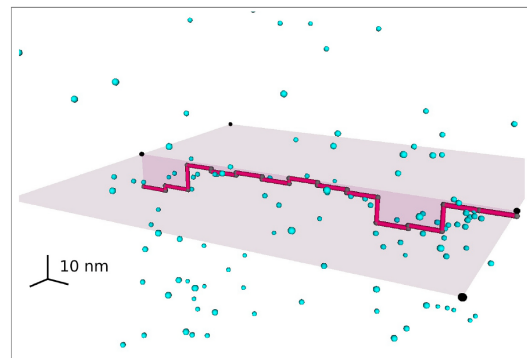
réduites, typiquement de l'ordre de  $(200 \text{ nm})^3$ , au mieux  $(1 \mu\text{m})^3$  sous certaines conditions [Domain et Becquart, 2020].

Ces points relèguent le plus souvent l'E/OKMC à une méthode de plus basse échelle, utilisée pour alimenter les méthodes à des échelles supérieures telles que la dynamique d'amas [Domain et Becquart, 2020] ou encore la Dynamique des Dislocations Discrètes [McElfresh *et al.*, 2021].

## 1.2 La Dynamique des Dislocations Discrètes



(a) Simulation de la propagation d'une fissure courte dans du cuivre [Korzeczek, 2017].



(b) Structure de dislocation après  $1 \mu\text{s}$  de montée à 1000K et sous une pression de 100MPa [McElfresh *et al.*, 2021].

FIGURE 1.2 – Résultats de simulations par Dynamique des Dislocations Discrète.

La Dynamique des Dislocations Discrètes (DDD) décrit les dislocations comme des objets discrets. Les techniques de simulations basées sur la DDD constituent un sujet de recherche actif depuis ces 30 dernières années [Lepinoux et Kubin, 1987; Ghoniem et Amodeo, 1988; Schwarz, 1999, 2003; Weygand *et al.*, 2002]. Cette méthode intègre le caractère discontinu de la plasticité cristalline. Intervenant à une échelle plus petite, elle vient en complément des modèles de plasticité continue (lois viscoplastiques, plasticité cristalline...), notamment lorsqu'il s'agit de simuler des cas de chargements complexes où les données expérimentales font défaut [Ghoniem, 2012]. Initialement développée pour décrire le glissement des dislocations, la DDD a été ensuite étendue aux processus de montée [Bakó *et al.*, 2006; Lim *et al.*, 2009, 2012]. McElfresh *et al.* [2021] l'utilisent couplée à une méthode Monte Carlo Cinétique (voir section 1.1.2) pour simuler la montée de dislocations en tenant compte du contournement d'un précipité. Korzeczek [2017] (voir figure 1.5) couple la DDD avec des solveurs élastiques Éléments Finis (voir section 1.3) pour tenir compte de géométries complexes et des surfaces libres, notamment pour prédire l'évolution de fissures courtes dans des matériaux métalliques. Ce travail se poursuit actuellement dans le cadre de la thèse de Louis Eon [Eon, 2022] qui couple la DDD avec une méthode de Champ de Phase (voir section 1.4) de propagation de fissures en utilisant cette fois un solveur élastique reposant sur des méthodes spectrales (transformées de Fourier rapides).

La DDD vise à décrire le comportement collectif d'un ensemble de dislocations. Celles-ci sont

décrites par des objets unidimensionnels. Dans un premier temps les segments de dislocations sont considérés comme infiniment longs et droits [Wang et LeSar, 1995]. La puissance de calcul disponible grâce aux calculateurs actuels permet de considérer des situations 3D, plus représentatives de la réalité [Devincre *et al.*, 2011].

La DDD procède d'abord à une discrétisation des dislocations en segments de tailles plus petites et considérés comme droits. La présence de ces segments de dislocations induit un champ de déplacement [Volterra, 1907; Mura, 1968]. Le segment de dislocation produit ainsi une contrainte qui, additionnée aux contraintes extérieures, met en mouvement les autres segments via la force de Peach et Koehler [Peach et Koehler, 1950]. De part la longue portée des champs élastiques considérées, nous avons affaire à un problème de mouvement collectif à  $N$  corps où chaque segment interagit avec tous les autres. Ceci implique en particulier un calcul de la force de Peach et Koehler en  $\mathcal{O}(N^2)$ , ce qui est numériquement prohibitif. Sous certaines hypothèses, il est possible de résoudre ce système d'équations de manière approchée dans un temps de simulation raisonnable. Les calculs par méthodes multipolaires rapides [Arsenlis *et al.*, 2007] permettent ainsi une algorithmique en  $\mathcal{O}(N)$  tandis que les méthodes de calculs par transformées de Fourier permettent une complexité en  $\mathcal{O}(N \log N)$  [Bertin *et al.*, 2015]. Les nucléations ainsi que les annihilations de dislocations sont également prises en compte, ainsi que les jonctions, croisements et autres interactions avec des surfaces libres (au moyen de couplage avec des solveurs élastiques qui permettent de calculer les forces d'interaction quelle que soit la géométrie). Il est cependant à noter que la prise en compte de toutes ces possibilités d'évolutions et notamment la nucléation, accroissent d'autant le nombre de segments à prendre en compte et donc le coût numérique indépendamment de la complexité de l'algorithme utilisé.

Dans le cadre des travaux de cette thèse, les résultats avancés par McElfresh *et al.* [2021] nous semblent particulièrement intéressants. Des résultats de montée d'une dislocation en présence d'un précipité sphérique y sont présentés (voir figure 1.6). Les auteurs y traitent du glissement et de la montée de dislocations (voir figure 1.2b). Pour traiter de ces deux phénomènes aux origines physiques très différentes et qui impliquent des échelles de temps très différentes, les auteurs réalisent un couplage ingénieux entre de la DDD pour traiter le glissement d'une part et une méthode Monte Carlo Cinétique Atomique (AKMC) [Soisson *et al.*, 2010] afin de reproduire le caractère stochastique de l'émission/absorption de lacunes durant le phénomène de montée d'autre part. Les lacunes sont donc considérées individuellement par leur fréquence de saut. En conséquence, les simulations présentées n'excèdent pas  $1\mu\text{s}$  à 1000K. Conscients des difficultés d'application de ce couplage, les auteurs voient surtout dans cette approche originale un moyen de fournir aux modèles de DDD des mobilités de lacunes reflètes de phénomènes physiques à plus basses échelles et donc thermodynamiquement plus cohérentes. En ce sens, ces travaux rejoignent ceux de Geslin *et al.* [2015] dans le cadre de la modélisation Champ de Phase que nous détaillerons section 1.4.

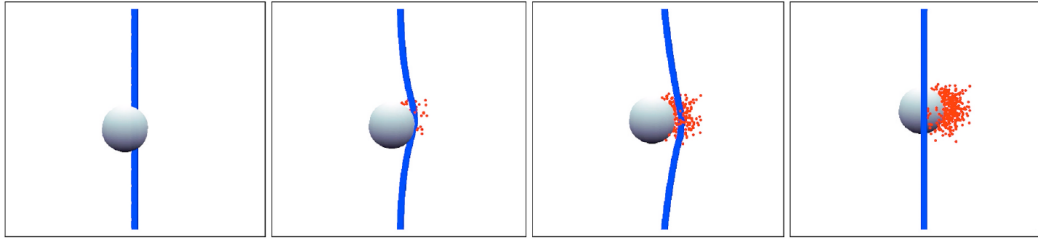
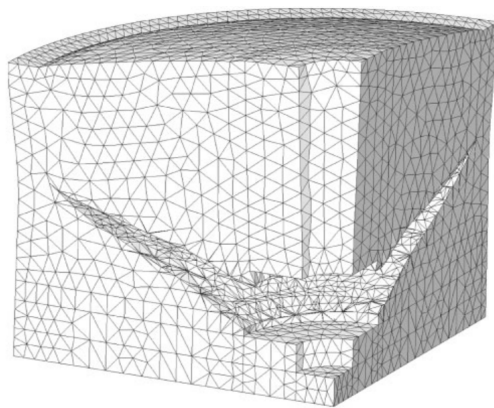


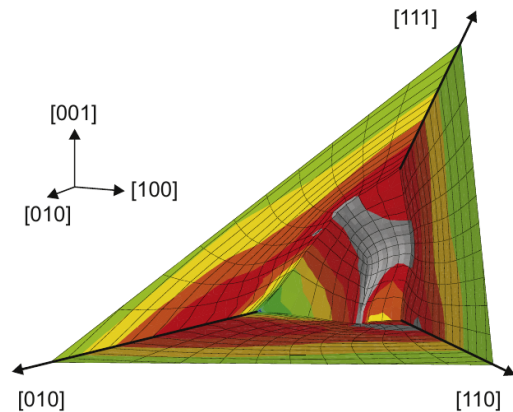
FIGURE 1.3 – Montée d'une dislocation en présence d'un précipité sphérique. Prises de vues à différents instants [McElfresh *et al.*, 2021].

### 1.3 Éléments Finis

La méthode des Éléments finis (FEM) est utilisée pour résoudre des problèmes décrits par équations aux dérivées partielles (EDP) définis sur un milieu continu. On définit à cet effet une formulation intégrale équivalente sur un milieu discrétisé [Batoz et Dhatt, 1990; Dhatt et Touzot, 1984; Zienkiewicz *et al.*, 1977].



(a) Simulation par éléments finis d'une fissure (Areias et Belytschko [2005]). Les déplacements sont amplifiés d'un facteur 200.



(b) Simulation par éléments finis de la fermeture d'un pore par pressage isostatique à chaud (Epishin *et al.* [2013a]). Carte de la contrainte plastique résiduelle.

FIGURE 1.4 – Exemples de simulations par éléments finis

La méthode des éléments finis consiste en la simplification du domaine initial en un jeu d'éléments fini. Au sein de ces éléments, le champ solution de l'EDP est discrétisé. Les points de discrétisation sont appelés nœuds. On définit ensuite des fonctions d'interpolation qui lient les valeurs nodales entre elles. Au sein de chaque élément, la formulation faible associée à l'EDP initiale permet de décrire le comportement de chaque nœud par un système linéaire. Afin de prendre en compte les interactions entre éléments contenues dans les nœuds partagés et les conditions aux limites, il est nécessaire de rassembler chaque système linéaire élémentaire au sein d'un système linéaire global. Ce système est numériquement résolu. L'EDP est donc exactement résolue aux nœuds. Les fonctions d'interpolation permettent ensuite d'obtenir la valeur approchée du champ solution en chaque point de l'espace.

Les avantages de la FEM sont multiples. Une telle méthode permet en effet d'étudier des objets

complexes pourvu que le maillage s'adapte à cette complexité (voir [figure 1.6](#)). La FEM permet également de tenir compte de conditions aux limites variées et de natures différentes. Naturelle dans son élaboration, cette méthode a très vite été popularisée. De nombreux logiciels très utilisés en ingénierie implémentent des méthodes aux éléments finis (ABAQUS, ANSYS etc.). Conduction thermique, mécanique, vibrations, bio-mécanique, mécanique des fluides [[Selleri et al., 2001](#); [MacGinnis et al., 2014](#)] sont autant de domaines où la FEM est majoritairement utilisée. La méthode des éléments finis étendus [[Melenk, 1995](#)] a également été développée afin de décrire des discontinuités dans le domaine d'étude. Fissures, joints de grain, dislocations ou encore évolutions multi-phasiques peuvent être étudiées [[Areias et Belytschko, 2005](#); [Belytschko et al., 2009](#)].

Si polyvalente et développée que soit cette méthode, plusieurs limites sont à noter. Premièrement, la qualité du résultat obtenu dépend du maillage utilisé [[Munjiza et John, 2002](#)]. De plus, l'enjeu de telles méthodes est de disposer d'une loi de comportement adéquate qui introduit tous les éléments physiques que l'on veut étudier. Ces méthodes consistent à manipuler des grandeurs physiques ou observables moyennées à une échelle spatio-temporelle qui ne rend le plus souvent pas compte des processus microscopiques fondamentaux.

L'évolution du système repose sur des lois de comportement qui font intervenir ces grandeurs et qui sont (dans la très grande majorité des cas) intuités phénoménologiquement (les procédures de changement d'échelle propres sont souvent inexistantes). De fait, ces méthodes ont une portée descriptive et predictive limitées notamment lorsque le système étudié possède de nombreux degrés de libertés (couplages multi-physiques) et/ou que l'on cherche à simuler des systèmes dans des conditions qui ne sont pas celles pour lesquelles les lois de comportement utilisées ont été calibrées. L'exemple de [Epishin et al. \[2013a\]](#) illustre bien ces difficultés dans le cadre du pressage isostatique à chaud, lieu de couplages multi-physiques très riches. Dans cet article, des dislocations interagissent avec un pore par le biais d'une loi de comportement visco-plastique. L'influence éventuelle des lacunes ainsi que la tension de surface du pore ne sont pas prises en compte. Les auteurs aboutissent, entre autres problèmes, à des cinétiques en désaccord avec les observations expérimentales. Un travail reste à faire afin de réduire le degré de phénoménologie des lois visco-plastiques décrivant le comportement mécanique à l'échelle continue. La démarche la plus satisfaisante serait d'effectuer une technique de changement d'échelle depuis une dynamique de dislocation. À ce jour, cette approche n'a été réalisée qu'à 2D dans le cadre simplifié où un seul système de glissement est considéré [[Valdenaire et al., 2016](#); [Groma et al., 2016](#)].

## 1.4 Le formalisme champ de phase

Le formalisme champ de phase est particulièrement adapté à l'étude de l'évolution des microstructures d'alliages. Il constitue une alternative aux modèles aux interfaces abruptes, souvent coûteux et plus difficiles à mettre en œuvre numériquement quand il y a des changements topologiques notamment à trois dimensions. Son approche originale a largement contribué à sa popularité depuis ces trente dernières années comme en attestent les nombreux articles de revue publiés à son sujet [[Chen, 2002](#); [Thornton et al., 2003](#); [Singer-Loginova et Singer, 2008](#); [Emmerich, 2008](#); [Moelans et al., 2008](#); [Stein-](#)

bach, 2009; Qin et Bhadeshia, 2010; Finel *et al.*, 2010; Ahmed et El-Azab, 2020; Tournet *et al.*, 2022] ou encore la variété des applications actuelles, au delà de la science des matériaux, telles que la solidification ou la fracture (pas uniquement dans le cas d'alliages), l'étude des ferroélectriques, des systèmes biologiques (vésicules, tumeurs, fracture de tissus) ou encore des habitats des termites... L'approche champ de phase est une approche dite « à interface diffuse ». La microstructure est décrite par des variables ou champs, fonctions continues de l'espace et du temps. Les interfaces sont alors implicitement décrites par les régions dans lesquelles la variation spatiale des champs est rapide.

L'approche champ de phase est une méthode variationnelle. Elle permet de décrire des situations thermodynamiques hors équilibre. Elle repose sur la minimisation de l'énergie libre mésoscopique de la microstructure étudiée. Cette énergie est fonction des champs qui caractérisent la microstructure. Ce cadre thermodynamique fait du champ de phase un outil privilégié pour étudier les couplages multiphysiques. Les ingrédients physiques qui peuvent être introduits au travers des différents champs sont très variés, allant de la chimie à l'électromagnétisme, en passant par l'élasticité et la plasticité. Cette versatilité explique l'utilisation désormais popularisée de cette méthode, au-delà de l'étude des microstructures [Provatas et Elder, 2011; Biner, 2017]. En science des matériaux ces méthodes ont été utilisées dans de nombreux domaines, comme la solidification [Karma, 2001], la transformation de phase à l'état solide, la croissance de grains, la propagation de fissure [Bourdin *et al.*, 2000], l'étude des matériaux irradiés, la formation et la croissance de cavités.

Méthode de choix pour l'étude des couplages multiphysiques, le champ de phase présente également quelques limites que nous détaillons maintenant. D'un point de vue théorique, le champ de phase rend compte des morphologies *via* la compétition entre l'énergie des phases elles-mêmes et celles de leurs interfaces et des cinétiques à travers des coefficients de mobilité. La description ne pourra souvent qu'être qualitative principalement pour deux raisons : (i) il existe des mécanismes qui affectent l'évolution des interfaces et qui ne peuvent pas être fidèlement reproduits par un modèle dans lequel celles-ci sont diffuses et représentées seulement par la valeur d'une énergie d'interface. (ii) l'évolution des champs repose sur des dynamiques qui ne tiennent pas compte des fluctuations ou qui, quand elles le font, l'intègrent de manière qualitative (l'échelle des temps de la simulation est alors intuitée par comparaison avec l'expérience ou des simulations alternatives quantitatives). Sur ce dernier point, il faut noter qu'il existe des procédures dites de changement d'échelle (« coarse-graining ») rigoureuses qui permettent dans certains cas de proposer des lois d'évolution de champ quantitatives pour le champ de phase [Bronchart *et al.*, 2008; Geslin *et al.*, 2015]. Des approches champ de phase permettent également d'utiliser des potentiels empiriques issus de simulations à de plus basses échelles (dynamique moléculaire, théorie de la densité fonctionnelle) [Kim *et al.*, 1999]. Sur l'aspect numérique, le champ de phase requiert que les interfaces diffuses soient spatialement résolues à l'échelle du pas de grille de discrétisation numérique. En pratique, cette contrainte limite la taille globale des systèmes simulables. Cette difficulté peut être contournée à l'aide d'une formulation originale des modèles champs de phase dite S-PFM (Sharp-Phase-Field Method) qui a été développée durant mon stage de fin d'étude effectué au LEM et publiée dans Finel *et al.* [2018].



### 1.4.1 Exemple d'un modèle champ de phase à un champ

Dans cette partie nous détaillons la construction d'un modèle de champ de phase dans son expression la plus simple. Nous définissons un champ  $\psi(\mathbf{r}, t)$ , qui peut typiquement décrire un alliage biphasique. Conformément à la démarche exprimée plus haut, nous lui associons une énergie libre  $\mathcal{F}$  [J], intégrale sur un volume  $V$  [m<sup>3</sup>] d'une densité d'énergie libre. La fonctionnelle d'énergie la plus simple qui permet l'existence d'une interface avec une épaisseur  $w$  [m] et une énergie  $\gamma$  [J.m<sup>-2</sup>] données est définie par :

$$\mathcal{F}(\{\psi\}) = \int_V \left\{ f(\psi) + \frac{B}{2} |\nabla\psi|^2 \right\} dV \quad (1.6)$$

où

$$f(\psi) = A\psi^2(1-\psi)^2 \quad (1.7)$$

Le lien entre  $A$ ,  $B$ ,  $w$  et  $\gamma$  est donné [Annexe A](#). Nous détaillons à présent les lois d'évolution des champs qui sont associées à la dissipation de l'énergie  $\mathcal{F}$ . Dans le cadre simple que nous venons de décrire, cette dissipation peut se faire suivant deux cas de figure concernant la dynamique du champ  $\psi$ . Cette dynamique peut être non-conservative. C'est en particulier le cas lors d'une transformation de phase où la fraction de chacune des phases, caractérisée par  $\psi$ , n'est pas conservée. Une telle dynamique suit l'équation d'Allen-Cahn [[Allen et Cahn, 1979](#)] :

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = -L \frac{\delta\mathcal{F}}{\delta\psi} \quad (1.8)$$

où  $L$  est la mobilité du champ  $\psi$  et  $\delta\mathcal{F}/\delta\psi$  la force motrice associée à cette évolution.  $L$  définit donc un temps caractéristique d'évolution de  $\psi$ . Cette mobilité est le reflet de phénomènes physiques intervenant à une échelle inférieure. Par exemple, dans des travaux menés au LEM récemment pour décrire la montée de dislocations [[Geslin et al., 2015](#)], la mobilité  $L$  a pu être reliée à des mécanismes fondamentaux associés à la formation de crans. Une formulation analytique de  $L$  faisant intervenir des grandeurs physiques microscopiques a pu être proposée. Le champ  $\psi$  peut également évoluer de manière conservative, comme lorsqu'il décrit une concentration en soluté par exemple. Cette situation est décrite par l'équation de Cahn-Hilliard [[Cahn et Hilliard, 1958](#)] :

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = \nabla \cdot \left( M(\psi) \nabla \frac{\delta\mathcal{F}}{\delta\psi} \right) \quad (1.9)$$

Cette équation n'est autre que l'équation de conservation du champ  $\psi$  :

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0 \quad (1.10)$$

où  $\mathbf{j}$  est le flux du champ  $\psi$  défini par :

$$\mathbf{j} = -M(\psi) \nabla \frac{\delta\mathcal{F}}{\delta\psi} \quad (1.11)$$

où  $M$  est un coefficient de mobilité qui dépend généralement de  $\psi$  et  $\delta\mathcal{F}/\delta\psi$  la force motrice du champ  $\psi$ . Cette force motrice est le potentiel chimique de l'espèce décrite par le champ  $\psi$ . Lorsque la

mobilité ne dépend pas du champ  $\psi$ , cette équation se simplifie comme suit :

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = M \nabla^2 \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \psi} \quad (1.12)$$

Dans certaines situations, un changement d'échelle permet d'obtenir simultanément l'énergie libre, la mobilité ainsi qu'un terme de bruit qui rend compte de la fluctuation du champ  $\psi$  [Bronchart *et al.*, 2008].

## 1.4.2 Cavités, lacunes et dislocations en champ de phase

Le modèle que nous venons de présenter convient à l'évolution d'un alliage biphasique. Nous allons maintenant passer en revue plusieurs travaux de recherche qui couplent plusieurs champs entre eux. Nous nous intéresserons notamment à la façon d'inclure des lacunes et des interstitiels ainsi qu'à la façon de traiter les boucles de dislocation.

### 1.4.2.1 Formation de cavités par diffusion de lacunes

Depuis les années 2010, le champ de phase s'est avéré être un outil de choix dans l'étude des solides irradiés. La modélisation par champ de phase de la formation et de l'évolution de cavités dans les solides irradiés possède ainsi une riche littérature. Il existe principalement deux formulations pour simuler la formation de cavités par diffusion de lacunes. Celle apparue historiquement en premier considère la cavité comme un agrégat de lacunes [Yu et Lu, 2005; Hu et Henager Jr, 2009]. Cette formulation fait en particulier le choix de ne pas introduire de champ auxiliaire pour décrire les cavités, à l'inverse de méthodes développées ultérieurement comme celles proposées par Rokkam *et al.* [2009] ou Millett *et al.* [2011a].

#### La cavité vue comme agrégat de lacunes

Nous présentons ici la démarche de Yu et Lu [2005]. Les auteurs se placent dans le cadre d'une matrice sursaturée en lacunes et ne considèrent pas d'interstitiels. Pour une position  $\mathbf{r}$  et un temps  $t$  donné,  $c(\mathbf{r}, t)$  représente la concentration en lacunes dans la matrice. Ce champ est couplé à un champ de déformation  $\underline{\epsilon}(\mathbf{r}, t)$ . L'énergie libre du système  $\mathcal{F}$  est décrite par l'équation suivante :

$$\mathcal{F}(c, \underline{\epsilon}) = \int_V \left\{ f(c) + \kappa |\nabla c|^2 + f^{\text{el}}(c, \underline{\epsilon}) \right\} dV \quad (1.13)$$

$f(c)$  est la densité d'énergie chimique du cristal décrite par l'équation ci-après :

$$f(c) = E_v^f c + E_a^f (1 - c) + N k_B T [c \ln c + (1 - c) \ln(1 - c)] + N \Omega c (1 - c) \quad (1.14)$$

où  $E_v^f$  est l'énergie de formation d'une lacune par unité de volume et  $E_a^f$  l'énergie de formation de l'espèce chimique constituant la matrice par unité de volume.  $N$  est le nombre de sites atomiques par unité de volume et  $k_B$  la constante de Boltzmann.  $\Omega$  permet d'influer sur la morphologie de la densité d'énergie chimique  $f(c)$ . En particulier, lorsque  $\Omega > 2k_B T$ ,  $f(c)$  possède deux minima et favorise



la précipitation de deux phases.  $f^{\text{el}}(c, \underline{\epsilon})$  est la densité d'énergie élastique. Dans le cadre des petites déformations elle s'écrit :

$$f^{\text{el}}(c, \underline{\epsilon}) = \frac{1}{2} C_{ijkl}^0 (1-c) \left[ \epsilon_{ij} - \epsilon_{ij}^0(c) \right] \left[ \epsilon_{kl} - \epsilon_{kl}^0(c) \right] \quad (1.15)$$

où  $\underline{\epsilon}^0(c)$  est le tenseur de déformation propre associé aux lacunes.  $C_{ijkl}^0$  est le tenseur des rigidités associé à la matrice. La présence d'une cavité se traduit par une forte concentration en lacunes. L'énergie élastique est rendue nulle à l'intérieure de celle-ci. Le terme  $\kappa$  permet de contrôler l'énergie d'interface d'une manière analogue à ce qui est présentée dans la [section 1.4.1](#). Le champ de lacunes évolue selon une dynamique conservative, décrite par une équation de type Cahn-Hilliard (voir [équation \(1.9\)](#)) tandis que l'équilibre mécanique, résolu numériquement, est considéré atteint à chaque pas de temps.

[Yu et Lu \[2005\]](#) montrent le rôle de l'anisotropie de l'énergie élastique dans la formation de motifs de cavités dans une matrice de nickel sursaturée en lacunes. En utilisant  $c$  et  $\underline{\epsilon}^0(c)$  pour décrire la dissolution d'un gaz dans la matrice, il montrent également comment l'élasticité favorise l'organisation en motifs des bulles de gaz de taille nanométriques dans le molybdène. L'analyse menée est qualitative et semble corroborer l'expérience. Notons que les concentrations en lacunes ou en gaz dans la matrice sont de l'ordre 0.1, ce qui est très élevé. Le problème étudié ici s'apparente à une décomposition spinodale où les précipités s'organisent en motifs qui croissent dans des directions perpendiculaires aux directions d'énergie élastiques minimales.

### La cavité décrite par un champ auxiliaire non conservé

Nous détaillons dans ce paragraphe le modèle développé dans [Rokkam et al. \[2009\]](#), qui considère deux champs  $c(\mathbf{r}, t)$  et  $\eta(\mathbf{r}, t)$  pour décrire l'évolution d'une cavité au sein d'une matrice sursaturée en lacunes. Considérons un champ de concentration en lacunes  $c(\mathbf{r}, t)$  et un champ de présence  $\eta(\mathbf{r}, t)$  associé aux cavités.  $\eta$  vaut 1 lorsque  $\mathbf{r}$  est dans une cavité et 0 partout ailleurs. La fonctionnelle d'énergie  $\mathcal{F}$  qui décrit le système sursaturé en lacunes est la suivante :

$$\mathcal{F}(c, \eta) = N \int_V \left\{ h(\eta) f^{\text{m}}(c) + w(c, \eta) + \kappa_v |\nabla c|^2 + \kappa_\eta |\nabla \eta|^2 + f^{\text{el}}(c, \eta, \underline{\epsilon}) \right\} dV \quad (1.16)$$

$N$  est le nombre de sites atomiques par unité de volume.  $f^{\text{el}}(c, \eta, \underline{\epsilon})$  est l'énergie élastique par site atomique. L'énergie chimique par site atomique  $f^{\text{m}}(c)$  est décrite par l'équation suivante :

$$f^{\text{m}}(c) = E_v^f c + k_B T \left[ c \ln c + (1-c) \ln(1-c) \right] \quad (1.17)$$

$E_v^f$  est l'énergie de formation des lacunes. Nous donnons également l'expression de  $h(\eta)$

$$h(\eta) = (\eta - 1)^2 (\eta + 1)^2 \quad (1.18)$$

Par le biais de  $h(\eta)$ , la contribution énergétique d'origine chimique  $f^{\text{m}}(c)$  n'existe que en dehors des cavités. Le terme de type Landau  $w(c, \eta)$  garantit la co-existence de deux phases, cavité et matrice. Cette contribution est définie de la manière suivante :

$$w(c, \eta) = -A(c - c_0)^2 \eta (\eta + 2) (\eta - 1) + B(c - 1)^2 \eta^2 \quad (1.19)$$

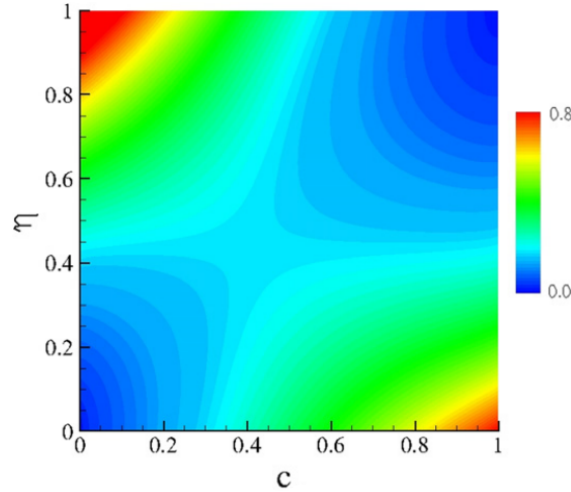


FIGURE 1.5 – Carte de la densité d'énergie chimique  $h(\eta)f^m(c) + w(c, \eta)$  [Rokkam *et al.*, 2009].

où  $c_0$  est la concentration de lacunes dans la matrice à l'équilibre. Les facteurs  $A$  et  $B$  sont constants. Ils servent à maîtriser la courbure de la contribution énergétique  $w(c, \eta)$ . Leur valeur est dictée par des considérations numériques. L'énergie chimique par site atomique  $h(\eta)f^m(c) + w(c, \eta)$  est représentée [figure 1.5](#). Ce paysage énergétique possède deux minima. L'un correspond au pore, caractérisé par  $c = 1$  et  $\eta = 1$ . L'autre correspond à la matrice où  $c = c_0$  (proche de zéro sur la figure) et  $\eta = 0$ . Le reste du domaine est pénalisé énergétiquement,  $A$  et  $B$  réglant l'intensité de cette pénalité.

Les champs  $c$  et  $\eta$  évoluent selon des dynamiques qui dépendent chacune uniquement de la seule force motrice associée au champ considéré. Le champ  $c$  évolue selon une dynamique conservative tandis que le champ  $\eta$  n'est pas conservé et évolue en suivant une équation de relaxation. Des fluctuations thermiques sont également prises en compte dans le modèle, aussi bien pour le champ  $c$  que pour le champ  $\eta$  à travers les termes stochastiques  $\xi(\mathbf{r}, t)$  et  $\zeta(\mathbf{r}, t)$  respectivement. La nucléation de cavités est ainsi possible. Les équations correspondantes sont les suivantes :

$$\frac{\partial c}{\partial t} = M \nabla^2 \frac{1}{N} \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta c} + \xi(\mathbf{r}, t) + P_v(\mathbf{r}, t) \quad (1.20)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = -L \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \eta} + \zeta(\mathbf{r}, t) \quad (1.21)$$

L'ajout d'un terme de production  $P_v(\mathbf{r}, t)$  dans l'équation (1.20) permet de simuler la production de lacunes dans les cascades d'irradiation.

Ce modèle a été testé par les auteurs sur des cas 2D et comparé à des formules analytiques. Grâce à l'introduction du paramètre d'ordre  $\eta$ , le comportement de l'interface des cavités est bien reproduit. Nous voyons en particulier une sursaturation en lacunes se former à la surface des cavités, expression de l'effet Gibbs-Thomson lié à la présence d'une courbure locale. Qualitativement, ce modèle reproduit bien les différents stades de nucléation de cavités. Les termes stochastiques, pourtant introduits dans le modèle, ne sont pas testés dans l'article. Pour la nucléation, seul le terme  $P_v(\mathbf{r}, t)$  – à un facteur près, un simple générateur de nombres aléatoires – gouverne la production de lacunes. Ce terme ne dérive malheureusement pas de considérations physiques. Enfin, les auteurs sont obligés d'utiliser des sursa-

turations très élevées et non physiques afin de faire apparaître les cavités. Dans Wang *et al.* [2014], les auteurs analyse le comportement de leur modèle, très semblable à Rokkam *et al.* [2009], en regardant l'évolution des champs dans la limite où la largeur des interfaces tend vers zéro. Ils ne prennent cependant en compte ni les termes stochastiques ni les termes de production. Paul Millett et son équipe proposent enfin un modèle très complet [Millett *et al.*, 2011a,b] qui repose en grande partie sur les mêmes bases que Rokkam *et al.* [2009]. Un champ de concentration en interstitiels et en gaz sont pris en compte. On notera la présence dans ce modèle de joints de grain. Leur existence est décrite par les interfaces diffuses de champs de phase additionnels qui traduisent les différentes orientations des grains. L'influence des joints de grain sur la diffusion des lacunes est prise en compte par l'intermédiaire des hétérogénéités élastiques qu'ils génèrent ainsi que par la modification de la mobilité des lacunes dans les joints.

## Conclusion

Tous les modèles que nous venons de présenter permettent de décrire de manière complète bien que toujours qualitative la dynamique de nucléation et l'évolution de cavités dans un métal irradié. Des termes de production de lacunes ou d'interstitiels sont également pris en compte dans certains modèles. Ces termes traduisent les dommages causés par les cascades d'irradiation ou encore la production de lacunes ou d'interstitiels aux joints de grain. Ces développement reposent cependant sur l'introduction de mécanismes *ad hoc* qui ne sont pas présents dans la formulation variationnelle initiale du problème et dont la connexion avec les processus physiques sous-jacents dont ils sont censés rendre compte manque de justification. Enfin, certains modèles proposent une équation d'évolution du champ de concentration en interstitiels. Or, les coefficients de diffusion des interstitiels peuvent être jusqu'à  $10^{15}$  supérieurs (Nickel à 300K par exemple [Ehrhart *et al.*, 1991]) à ceux des lacunes [Wang *et al.*, 2014]. Considérer que l'évolution des interstitiels est quasi-statique avec l'évolution des lacunes apparaît ainsi comme une hypothèse pertinente [Hu et Henager Jr, 2009]. Celle-ci pourra d'ailleurs être mise à profit pour réduire le coût des simulations, en supprimant l'intégration explicite des équations d'évolution des interstitiels dont la concentration pourra alors être donnée par une condition de stationnarité.

### 1.4.2.2 Montée de dislocation

Nous présentons dans cette section un modèle champ de phase pour la montée de dislocations. Ce modèle a été établi par Pierre-Antoine Geslin *et al* [Geslin *et al.*, 2014b, 2015] et a depuis été repris avec quelques variantes par Ke *et al.* [2014] ou encore par Moladje *et al.* [2020a]. Ce modèle repose sur l'idée qu'une boucle de dislocation peut être vue comme une phase en forme de plaquette (voir figure 1.6) qui rend compte de la soustraction ou de l'addition d'un ou plusieurs plans cristallins dans un matériau ayant subi une déformation plastique [Nabarro, 1951]. On peut dès lors écrire une fonctionnelle énergétique qui rend compte des propriétés mécaniques et cristallines propres aux dislocations. Ce modèle lie également dislocations et lacunes par une loi de conservation qui permet de s'affranchir d'éventuels termes d'échanges explicites (voir section 1.4.2.1) en faisant naturellement émerger une dynamique couplée pour le phénomène de montée.

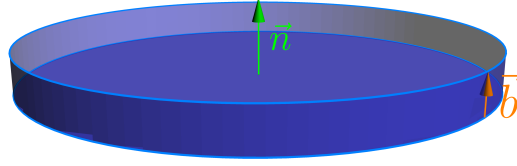


FIGURE 1.6 – La boucle de dislocation prismatique vue comme une plaquette de seconde phase caractérisée par une déformation libre d’allongement. La plaquette décrit la présence ou l’absence de lacune (ou respectivement l’absence ou la présence d’atomes). Le vecteur de Burgers est perpendiculaire au plan dans lequel le champ de phase est confiné.

### Définition des champs et d’une fonctionnelle énergétique :

Considérons  $n$  champs de phase  $\{\phi_\alpha\}_{\alpha=1,\dots,n}$  qui représentent  $n$  boucles de dislocations. Chaque boucle est caractérisée par un vecteur de Burgers  $\mathbf{b}^\alpha$ , une normale au plan de montée  $\mathbf{n}_\alpha$  et une déformation libre  $\epsilon_{ij}^{0,\alpha}(\mathbf{r})$  décrite par l’équation suivante [Mura, 1987] :

$$\epsilon_{ij}^{0,\alpha}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} (b_i^\alpha n_j^\alpha + b_j^\alpha n_i^\alpha) \delta(\xi) \quad (1.22)$$

où  $\delta$  est la fonction de Dirac et où  $\xi$  désigne la distance au plan de montée. La déformation libre induite par l’ensemble des dislocations en un point  $\mathbf{r}$  de l’espace s’écrit donc comme suit :

$$\epsilon_{ij}^{0,d}(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha=1}^n \epsilon_{ij}^{0,\alpha} h(\phi_\alpha) \quad (1.23)$$

où  $h(\phi_\alpha)$  est une fonction d’interpolation telle que  $h(0) = 0$ ,  $h(1) = 1$  et  $h'(0) = h'(1) = 0$ .  $h(\phi_\alpha)$  est donc une fonction de présence de la dislocation  $\alpha$ . Cette fonction pondère  $\epsilon_{ij}^{0,\alpha}(\mathbf{r})$  de sorte que la contribution élastique à l’énergie ne modifie pas les minima  $\phi = 0$  et  $\phi = 1$  associés à la densité d’énergie  $f_{\text{dislo}}(\phi)$  présentée plus bas. Par commodité nous considérons désormais la montée d’une seule boucle de dislocation caractérisée par le champ  $\phi$ , par son vecteur de Burgers  $\mathbf{b}$  et par la normale à son plan de montée  $\mathbf{n}$ .

Nous nous plaçons dans l’hypothèse d’un environnement où les lacunes constituent l’auto-défaut majoritaire. La montée de dislocation se fait par absorption/émission de lacunes uniquement. Considérons donc la présence d’un champ de concentration de lacunes dans la matrice noté  $c(\mathbf{r})$ . On associe à chaque lacune une déformation propre  $\epsilon_{ij}^{0,v}$  donnée par :

$$\epsilon_{ij}^{0,v} = \delta_{ij} \frac{1}{3} \frac{V^*}{\Omega} \quad (1.24)$$

où  $V^*$  est le volume de relaxation lié à la présence d’une lacune,  $\Omega$  le volume atomique et  $\delta$  le symbole de Kronecker. En vertu de la loi de Vegard, nous considérons que la déformation propre associée à la présence de lacunes varie linéairement avec  $c$ . La déformation propre induite par l’ensemble des lacunes en un point de l’espace  $\mathbf{r}$  s’écrit alors :

$$\epsilon_{ij}^{0,v}(\mathbf{r}) = \epsilon_{ij}^{0,v} c(\mathbf{r}) \quad (1.25)$$

L'énergie libre  $\mathcal{F}(\{c\}, \{\phi\}, \{\xi\})$  associée à l'ensemble du système de montée s'écrit de la sorte :

$$\mathcal{F}(\{c\}, \{\phi\}, \{\xi\}) = \int_V \left\{ f_{\text{chem}}(c) + f_{\text{dislo}}(\phi) + f_{\text{el}}(\phi, c, \xi) \right\} dV \quad (1.26)$$

Sous l'hypothèse d'une solution diluée, la densité d'énergie chimique  $f_{\text{chem}}(c)$  s'écrit :

$$f_{\text{chem}}(c) = \frac{E_f}{\Omega} c + \frac{E_f}{\Omega} \left( c \ln c + (1 - c) \ln(1 - c) \right) \quad (1.27)$$

où  $E_f$  est l'énergie de formation des lacunes. La densité d'énergie libre  $f_{\text{dislo}}(\phi)$  liée à la présence de la dislocation reprend la formulation détaillée [section 1.4.1](#) :

$$f_{\text{dislo}}(\phi) = A\phi^2(1 - \phi)^2 + \frac{B}{2} |\mathbf{n} \wedge \nabla \phi|^2 \quad (1.28)$$

Dans cette formule, le gradient du champ  $\phi$  est projeté dans le plan de montée par le produit vectoriel avec le vecteur normal  $\mathbf{n}$  de sorte qu'il est nul partout en dehors de ce plan. Les termes  $A$  et  $B$  sont liés à l'énergie et la largeur du cœur de la dislocation (voir [Annexe A](#)). Enfin, la densité d'énergie libre élastique  $f_{\text{el}}$  est écrite dans le cadre de l'hypothèse des petites déformations considérée comme valable même dans le cœur de la dislocation [[Geslin, 2013](#)] :

$$f_{\text{el}}(c, \phi, \xi) = \frac{1}{2} C_{ijkl} \left[ \epsilon_{ij} - \epsilon_{ij}^0(c, \phi) \right] \left[ \epsilon_{kl} - \epsilon_{kl}^0(c, \phi) \right] - \sigma_{ij}^A \bar{\epsilon}_{ij} \quad (1.29)$$

où  $\underline{\underline{C}}$  est le tenseur élastique et  $\sigma^A$  la contrainte externe appliquée au système.  $\bar{\xi} = \langle \xi \rangle$  est la déformation moyenne.  $\epsilon^0(c, \phi)$  est la déformation propre totale en un point du système. Elle s'obtient en sommant les déformations propres liées à la présence de la dislocation et de la concentration de lacunes,  $\epsilon^{0,d}(\phi)$  et  $\epsilon^{0,v}(c)$  respectivement. Son expression est la suivante :

$$\epsilon_{ij}^0(c, \phi) = \delta_{ij} \frac{1}{3} \frac{V^*}{\Omega} c + \frac{1}{2} (b_i n_j + b_j n_i) \delta(\xi) h(\phi) \quad (1.30)$$

### Dynamique :

L'idée-clé de ce modèle est de prendre en compte la conservation de la quantité totale de lacunes dans le système. La boucle de dislocation grossit ou se referme en absorbant ou en émettant des lacunes. Les champs  $c$  et  $\phi$  ne peuvent donc pas être considérés indépendamment l'un de l'autre. Leur somme  $\psi = c + \phi^1$  est conservée. Il est donc naturel, comme vu dans la [section 1.4.1](#), de faire évoluer ce champ selon une dynamique de type Cahn-Hilliard :

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \nabla \cdot \left( M \nabla \frac{\delta \mathcal{F}^*}{\delta \psi} \right) \quad (1.31)$$

$\mathcal{F}^*(\psi, \phi, \xi) = \mathcal{F}(c, \phi, \xi)$  est l'énergie libre du système exprimée en fonction des champs  $\psi$ ,  $\phi$  et  $\xi$ . Le champ  $\phi$  suit quant à lui une dynamique non conservative :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -L \frac{\delta \mathcal{F}^*}{\delta \phi} \quad (1.32)$$

---

1. Dans les applications numériques, les champs sont discrétisés sur une grille cubique de pas  $d$ . Si  $d$  est également l'épaisseur de la plaquette qui représente la boucle de dislocation ( $\phi(x) = 1$  si  $x$  est un nœud à l'intérieur de la boucle, 0 sinon), la relation de conservation discrète s'écrit  $\psi(x) = c(x) + \frac{b}{d} \phi(x)$  où  $b$  est l'amplitude du vecteur de Burgers. Si  $d = b$ , cette relation devient  $\psi(x) = c(x) + \phi(x)$

En réalisant le changement de variable  $c = \psi - \phi$ , on aboutit au jeu d'équations suivant :

$$\dot{c} = \nabla \cdot \left( M \nabla \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta c} \right) + L \left( \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \phi} - \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta c} \right) \quad (1.33)$$

$$\dot{\phi} = -L \left( \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \phi} - \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta c} \right) \quad (1.34)$$

La relaxation élastique est considérée comme quasi statique par rapport à l'évolution des champs  $\phi$  et  $c$ , ce qui se traduit par l'assertion suivante :

$$\forall t, \quad \nabla \cdot \underline{\sigma} = 0 \quad (1.35)$$

L'équation (1.33) montre que  $M$  est la mobilité du champ de lacunes. Il peut être relié au coefficient de diffusion  $D_v$  par la relation  $M(c) = \Omega D_v c(1-c)/k_B T$ .  $L$  contrôle les échanges entre les champs  $c$  et  $\phi$ . Sous l'hypothèse de l'équilibre local,  $L$  est infiniment grand. Il existe cependant de nombreux cas dans lesquels cette hypothèse n'est pas vérifiée [Seidman et Balluffi, 1965; Caillard et Martin, 2003; Edelin et Poirier, 1973]. La prise en compte de phénomènes à une échelle inférieure est alors nécessaire [Geslin et al., 2015].

### Aspects numériques :

Les équations (1.33) et (1.34) sont intégrées numériquement dans l'espace de Fourier. L'intégration temporelle est réalisée selon un schéma d'Euler explicite. L'intégration spatiale utilise un schéma aux différences finies sur grilles décalées [Geslin et al., 2014a]. L'équation (1.35) est quant à elle résolue numériquement à chaque pas de temps.

### Conclusion :

Le modèle que nous venons de décrire présente une description physique cohérente de la montée de boucles de dislocations en imposant la conservation du nombre totale de lacunes. Le comportement du modèle a été vérifié dans des situations simples et décrites analytiquement [Geslin et al., 2014b]. Geslin et al. [2015] permet, au travers du terme  $L$  d'échange entre les différents champs, de décrire des situations hors équilibre, en prenant en compte une densité de cran le long de la dislocation. La description des termes d'échanges comme dérivant directement d'une loi de conservation nous semble pertinente dans le cadre de cette thèse. Enfin, lorsque les entrées du modèle sont données par des méthodes de simulations à de plus basses échelles (DFT etc.), Rouchette et al. [2014], Rouchette et al. [2015] et Moladje et al. [2020b] montrent qu'il est possible d'obtenir des résultats quantitatifs sur la force de puits des dislocations.

## 1.5 Conclusion

Dans ce chapitre et à travers une étude bibliographique des méthodes de simulation existantes, nous avons montré la pertinence du formalisme champ de phase pour décrire la diffusion de lacunes et/ou d'interstitiels couplée à la mécanique, dans le but d'étudier la formation et l'évolution de cavités d'une part, et la montée des dislocations d'autre part. Nous allons désormais dans le chapitre suivant détailler

les étapes de la construction d'un modèle qui prend en compte à la fois des cavités et des dislocations dont les évolutions sont contrôlées par des flux de lacunes.

## CHAPITRE

# 2

## MODÈLE CHAMP DE PHASE COUPLANT LACUNES, CAVITÉS ET DISLOCATIONS

### Sommaire

---

<b>2.1</b>	<b>Définition du modèle champ de phase continu</b>	<b>26</b>
2.1.1	Champs pertinents	26
2.1.2	Fonctionnelle d'énergie libre	27
2.1.3	Cinétique	32
2.1.4	Conclusion	38
<b>2.2</b>	<b>Implémentation numérique</b>	<b>38</b>
2.2.1	Adimensionnement	38
2.2.2	Résolution des équations cinétiques et stratégie pour l'équilibre chimique	40
<b>2.3</b>	<b>Conclusion</b>	<b>44</b>

---



Dans ce chapitre, nous décrivons le modèle que nous avons construit pour mener à bien les travaux de cette thèse. À partir de la revue bibliographique faite [chapitre 1](#), nous définissons [section 2.1](#) les ingrédients physiques dont nous avons besoin pour décrire la microstructure définie dans l'introduction. Nous construisons un modèle champ de phase continu dans cette même section. Pour cela, nous construisons une énergie et la dissipons selon une dynamique choisie. Dans un second temps, [section 2.2](#), nous expliquons nos choix de discrétisation et d'adimensionnement. Nous détaillons les différentes stratégies numériques mises en place pour implémenter efficacement ce modèle et pouvoir en retirer des observations quantitatives dans un temps de simulation raisonnable.

## 2.1 Définition du modèle champ de phase continu

Dans cette section, nous définissons un modèle champ de phase continu couplant lacunes, cavités et montée de dislocations. Nous définissons dans un premier temps les champs pertinents. Dans un second temps nous construisons le paysage énergétique dans lequel évolue notre système. Enfin, nous détaillons les cinétiques selon lesquelles chaque champ évolue de manière à dissiper l'énergie du système.

### 2.1.1 Champs pertinents

Nous définissons un modèle champ de phase continu couplant lacunes, cavités et montée de dislocations. Nous considérons le système de taille  $(L_x, L_y, L_z)$  schématiquement présenté [figure 2.1](#). Une boucle de dislocation prismatique monte dans un plan  $x = x_0$ . Elle interagit avec un pore et un champ de lacunes. La présence de ces défauts induit des déformations locales. Pore et boucle de dislocation peuvent interagir par le biais de la diffusion de lacunes ou des interactions élastiques longue portée. La généralisation à plusieurs boucles, associées à différents plans de montée, et plusieurs pores est évidente. Nous définissons ci-après 4 champs :

- La boucle de dislocation prismatique est représentée par un champ  $\phi$  [[Geslin et al., 2014b](#)] :

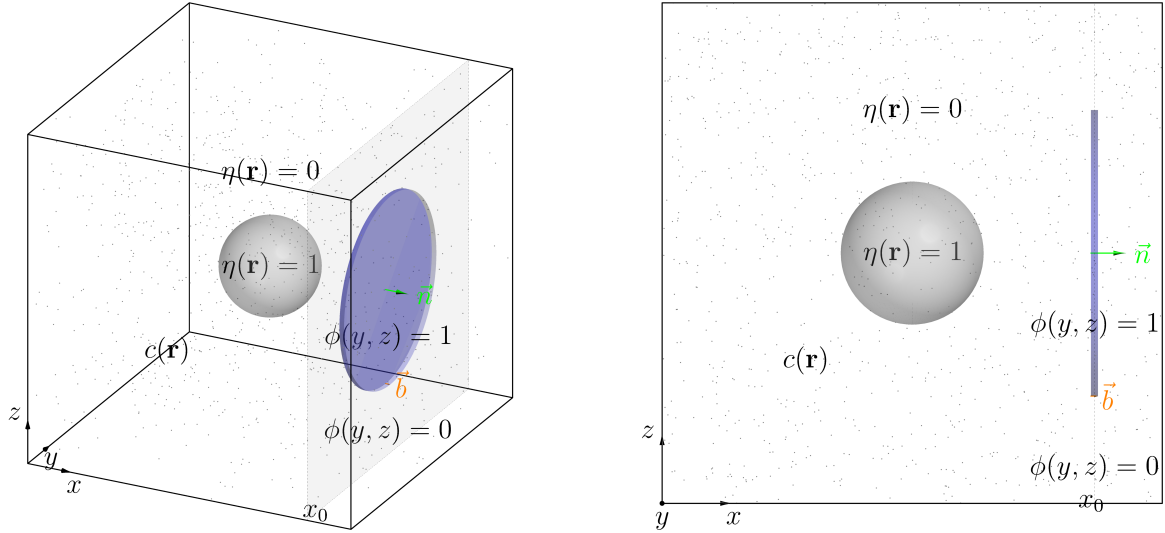
$$\Phi(\mathbf{r}, t) = \phi(y, z)\delta(x - x_0) \quad \text{où} \quad \phi((y, z), t) = \begin{cases} 0 & \text{à l'intérieur de la matrice} \\ 1 & \text{à l'intérieur de la boucle} \end{cases} \quad (2.1)$$

La fonction de Dirac  $\delta(x - x_0)$  traduit mathématiquement le confinement de la dislocation dans son plan de montée.

- Les lacunes sont représentées par leur champ de concentration  $c(\mathbf{r}, t)$ .
- Les cavités ou pores – les deux dénominations seront employées indifféremment – sont représentés par un champ  $\eta(\mathbf{r}, t)$  :

$$\eta(\mathbf{r}, t) = \begin{cases} 0 & \text{à l'intérieur de la matrice} \\ 1 & \text{à l'intérieur d'une cavité} \end{cases} \quad (2.2)$$

- Un champ de déformation  $\underline{\epsilon}(\mathbf{r})$  rend compte des effets élastiques au sein du système.


 FIGURE 2.1 – Représentation schématique du système simulé. Vue en 3D et vue selon  $y$ .

La cavité se ferme ou grossit par émission ou absorption de lacunes. La boucle de dislocation émet ou absorbe également des lacunes en se fermant ou en grossissant dans son plan de montée, ici en  $x = x_0$ . Une loi de conservation lie les champs  $\eta$ ,  $\phi$  et  $c$  [Geslin *et al.*, 2014b]. Nous définissons ainsi le champ conservé  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  suivant :

$$\Psi(x, y, z) = b \phi(y, z) \delta(x - x_0) + c(x, y, z) + \eta(x, y, z) \quad (2.3)$$

Comme nous le verrons plus loin, les champs  $\phi$  et  $\eta$ , non conservés, suivront une dynamique de type Allen-Cahn tandis que l'évolution du champ  $c$  sera déduite d'une équation de conservation de type Cahn-Hilliard imposée au champ  $\Psi$  (voir section 1.4.1).

### 2.1.2 Fonctionnelle d'énergie libre

À l'échelle mésoscopique, la densité d'énergie libre est formulée sous la forme d'une somme de densités d'énergie associées chacune à l'un des processus ou objets que l'on souhaite traiter. Ici, il s'agit de l'énergie liée à la présence de lacunes, représentées par le champ  $c(\mathbf{r})$ , de l'énergie liée aux cœurs des dislocations, représentées par le champ  $\phi(\mathbf{r})$ , de l'énergie associée à la surface des pores, représentés par le champ  $\eta(\mathbf{r})$  et, enfin, de l'énergie élastique associée à un champ de déformation  $\underline{\epsilon}(\mathbf{r})$ , lui-même généré par les variations spatiales des champs  $c(\mathbf{r})$ ,  $\phi(\mathbf{r})$  et  $\eta(\mathbf{r})$ . L'énergie libre totale  $\mathcal{F}$  sera donc une fonctionnelle de ces champs :

$$\mathcal{F}(\{c\}, \{\phi\}, \{\eta\}, \{\underline{\epsilon}\}) = \int_V \left\{ f_{\text{chem}}(c, \eta) + f_{\text{dislo}}(\phi) + f_{\text{pore}}(\eta) + f_{\text{elas}}(c, \phi, \eta, \underline{\epsilon}) \right\} dV \quad (2.4)$$

où  $f_{\text{chem}}(c, \eta)$ ,  $f_{\text{dislo}}(\phi)$  et  $f_{\text{pore}}(\eta)$  sont les densités d'énergie libre associées respectivement à la présence de lacunes, d'une boucle de dislocation, d'un pore et  $f_{\text{elas}}(c, \phi, \eta, \underline{\epsilon})$  la contribution élastique à l'énergie libre. Pour une raison qui apparaîtra dans le paragraphe suivant, la densité d'énergie  $f_{\text{chem}}(c, \eta)$  dépend également du champ  $\eta$ . Nous définissons maintenant ces différentes contributions.

### Densité d'énergie libre chimique des lacunes :

Dans cette partie, nous définissons la densité d'énergie libre chimique des lacunes dans le système. Son expression formelle prend une forme différente suivant que nous nous trouvons dans la matrice ou dans le pore. Dans la matrice, nous adoptons l'hypothèse d'une solution diluée  $c \ll 1$ . La contribution à l'énergie libre des lacunes s'écrit alors de la manière suivante :

$$f_{\text{chem}}^{\text{m}}(c) = \frac{E_f}{\Omega}c + \frac{k_B T}{\Omega} [c \ln c + (1 - c) \ln(1 - c)] \quad (2.5)$$

où  $E_f$  est l'énergie de formation d'une lacune,  $\Omega$  le volume atomique,  $k_B$  la constante de Boltzmann et  $T$  la température. En considérant que la concentration dans la matrice ne s'éloigne pas trop de sa valeur d'équilibre, on peut effectuer un développement au plus bas ordre de l'équation (2.5) et finalement considérer une variation d'énergie libre donnée par :

$$f_{\text{chem}}^{\text{m}}(c) = \frac{k_B T}{2\Omega c_0} (c - c_0)^2 \quad (2.6)$$

où  $c_0$  est la concentration d'équilibre des lacunes dans la matrice donnée par :

$$c_0 = \exp\left(-\frac{E_f}{k_B T}\right) \quad (2.7)$$

Les expressions exacte et approchée de  $f_{\text{chem}}^{\text{m}}(c)$  ont été tracées sur la figure 2.3a.

Dans le pore, une forme d'énergie chimique analogue est postulée, en considérant par définition que la concentration d'équilibre des lacunes est égale à 0 :

$$f_{\text{chem}}^{\text{p}}(c) = D \frac{k_B T}{2\Omega c_0} c^2 \quad (2.8)$$

Dans cette expression, un paramètre  $D$  sans dimension est introduit qui permet de contrôler la courbure de l'énergie libre des lacunes dans le pore, relativement à celle définie dans la matrice [Rokkam *et al.*, 2009]. Le rôle précis de ce paramètre et les choix de valeurs pertinentes seront discutés plus en détail dans le chapitre suivant.

Finalement, l'énergie libre chimique des lacunes  $f_{\text{chem}}(c)$  en un point quelconque du système fait intervenir le champ  $\eta$  qui indique localement si nous nous trouvons dans la matrice ( $\eta = 0$ ) ou dans le pore ( $\eta = 1$ ). Dans ce travail de thèse, nous avons fait le choix de l'expression suivante :

$$f_{\text{chem}}(c, \eta) = \frac{k_B T}{2\Omega c_0} \left( (D - 1) h(\eta) + 1 \right) \left( c - c_0(1 - h(\eta)) \right)^2 \quad (2.9)$$

où  $h(\eta)$  est une fonction d'interpolation monotone telle que  $h(0)=0$ ,  $h(1)=1$  et  $h'(0)=h'(1)=0$ . Les fonctions d'interpolation utilisées dans cette thèse sont données figure 2.2. On vérifie évidemment que lorsque nous sommes dans la matrice et que  $\eta = 0$ ,  $f_{\text{chem}}(c, 0) = f_{\text{chem}}^{\text{m}}(c)$ . Dans le pore,  $\eta = 1$  et nous avons bien  $f_{\text{chem}}(c, 1) = f_{\text{chem}}^{\text{p}}(c)$ . Une représentation graphique de  $f_{\text{chem}}$  donnée par l'équation (2.9) est donnée sur la figure 2.3b avec  $D = 1$ .

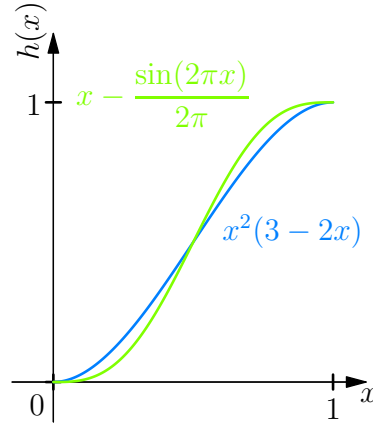
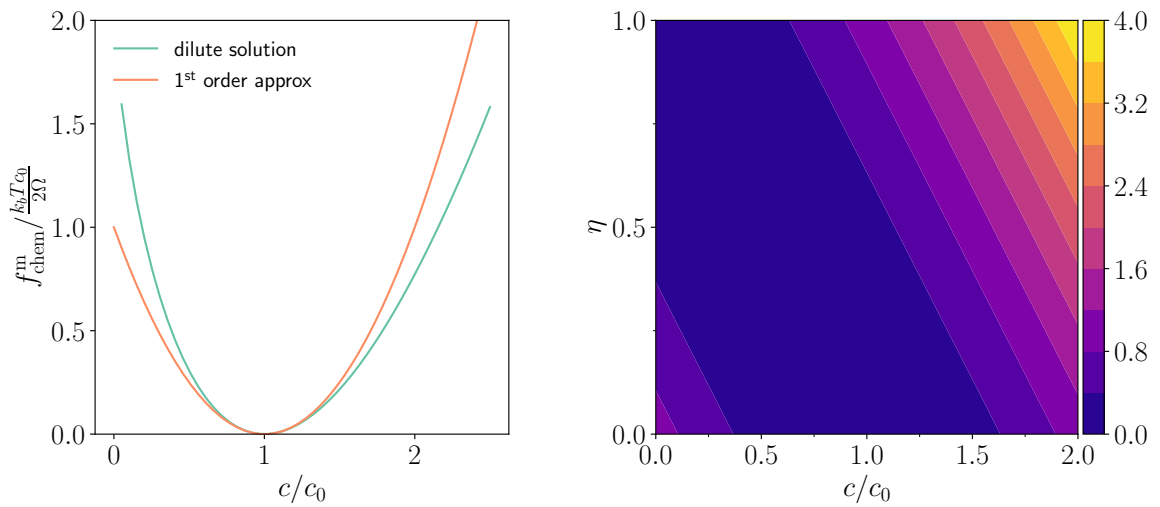


FIGURE 2.2 – Fonctions d’interpolation utilisées dans cette thèse.


 (a) Variation de  $f_{\text{chem}}^m(\frac{c}{c_0}) / \frac{k_B T c_0}{2\Omega}$ . Équation (2.5) et développement quadratique autour de  $c_0$ .

 (b)  $f_{\text{chem}}(\frac{c}{c_0}, \eta) / \frac{k_B T c_0}{2\Omega}$ ,  $D = 1$  (équation (2.9)).

 FIGURE 2.3 – Représentations graphiques de  $f_{\text{chem}}(c, \eta)$  [ $\text{J}\cdot\text{m}^{-3}$ ].

### Remarque

Nous sommes conscients des limites qu’imposent l’hypothèse selon laquelle  $c$  ne s’éloigne pas trop de  $c_0$  et qui nous permet d’obtenir l’équation (2.6). L’étude de situations sous irradiation peut faire intervenir des concentrations de l’ordre de  $10^{10}c_0$ . De telles situations ne sont cependant pas abordées dans cette thèse. Malgré tout, les résultats présentés dans cette thèse font intervenir des concentrations allant de 0.5 à 2.5  $c_0$ . La figure 2.3a nous montre que la contribution énergétique n’en est pas substantiellement modifiée. Dans le chapitre 3, nous contrôlons par ailleurs le bon comportement de notre modèle en comparant ses prédictions avec des formules analytiques. Nous nous assurons ainsi que le modèle n’est pas affecté par la description de la contribution énergétique chimique. Si à l’avenir, une poursuite de ces travaux de thèse était envisagée et dans laquelle des situations où  $c \neq c_0$  étaient à l’étude, cela impliquerait des changements mineurs dans le code et ne remettrait en cause ni le modèle en lui-même, ni les

stratégies numériques choisies, ni les conclusions portant sur les phénomènes physiques élémentaires à l'œuvre.

### Densité d'énergie libre pour les dislocations :

La boucle de dislocation ne peut se mouvoir que dans son plan de montée. La densité  $f_{\text{dislo}}(\phi)$ , qui rend compte de l'énergie associée aux cœurs, doit donc être confinée dans ce plan. Ce même plan peut par ailleurs contenir plusieurs boucles incluses les unes dans les autres. La densité  $f_{\text{dislo}}(\phi)$  doit donc vérifier la propriété  $f_{\text{dislo}}(\phi \pm 1) = f_{\text{dislo}}(\phi)$ . La densité d'énergie libre associée au champ de présence des dislocations est alors donnée par :

$$f_{\text{dislo}}(\phi) = \Gamma_d \left( \frac{\pi}{8w_d} (1 - \cos(2\pi\phi)) + \frac{\pi}{4} w_d |\mathbf{n} \wedge \nabla\phi|^2 \right) \delta(x - x_0) \quad (2.10)$$

où  $\Gamma_d$  [J.m<sup>-1</sup>] est l'énergie du cœur de la dislocation et  $w_d$  [m] sa largeur (voir [Annexe A](#)).  $\mathbf{n}$  est le vecteur normal au plan de montée (voir [figure 2.1](#)).

### Densité d'énergie libre pour les pores/cavités :

$f_{\text{pore}}(\eta)$  doit discriminer deux phases. Les cavités sont définies par  $\eta = 1$  tandis que la matrice est définie par les régions de l'espace où  $\eta = 0$ . Les interfaces se situent dans les régions de variations entre ces deux valeurs. Nous choisissons donc la description énergétique classiquement utilisée pour l'étude de systèmes biphasés :

$$f_{\text{pore}}(\eta) = \gamma_p \left( \frac{12}{w_p} \eta^2 (1 - \eta)^2 + \frac{3}{4} w_p |\nabla\eta|^2 \right) \quad (2.11)$$

où  $\gamma_p$  [J.m<sup>-2</sup>] est l'énergie de surface de la cavité et  $w_p$  [m] sa largeur (voir [Annexe A](#)).

### Densité d'énergie libre élastique :

Nous nous plaçons dans le cadre des petites déformations. Nous supposons en particulier que cette hypothèse reste valable dans le cœur de la boucle de dislocation [[Geslin et al., 2014b](#)]. La contribution élastique à l'énergie libre s'écrit comme suit :

$$f_{\text{elas}}(c, \phi, \eta, \underline{\epsilon}) = \frac{1}{2} C_{ijkl}(\eta) [\epsilon_{ij} - \epsilon_{ij}^0(\phi, c)] [\epsilon_{kl} - \epsilon_{kl}^0(\phi, c)] - \sigma_{ij}^A \bar{\epsilon}_{ij} \quad (2.12)$$

$\underline{\sigma}^A$  est la contrainte appliquée. Le tenseur  $\underline{\epsilon}(\mathbf{r})$  la déformation totale locale. De manière à assurer automatiquement la compatibilité des tenseurs de déformation, nous le définissons par dérivation d'un champ de déplacement continu, ce qui, en petite déformation, conduit à la formulation usuelle suivante :

$$\epsilon_{ij}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.13)$$

Si  $\bar{\epsilon}$  est la déformation moyenne, nous pouvons décomposer le champ de déplacement et le tenseur de déformation de la manière suivante :

$$u_i(\mathbf{r}) = \bar{\epsilon}_{ij}x_j + \delta u_i(\mathbf{r}) \quad (2.14)$$

$$\epsilon_{ij}(\mathbf{r}) = \bar{\epsilon}_{ij} + \delta\epsilon_{ij}(\mathbf{r}) \quad (2.15)$$

avec :

$$\delta\epsilon_{ij}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial\delta u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial\delta u_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.16)$$

$$\langle \delta\epsilon_{ij}(\mathbf{r}) \rangle = 0 \quad (2.17)$$

où  $\langle X \rangle$  est la moyenne de  $X$  sur le volume  $V$ .

Cette décomposition permet de considérer la déformation moyenne  $\bar{\epsilon}$  comme un degré de liberté indépendant, pourvu bien entendu que l'on impose au champ de déplacement hétérogène  $\delta u_i(\mathbf{r})$  des conditions aux limites qui assurent automatiquement la réalisation de l'équation (2.17). Nous verrons plus loin que nous utilisons des conditions aux limites périodiques sur le champ hétérogène  $\delta u_i(\mathbf{r})$ , ce qui garantit automatiquement l'équation (2.17).

Le tenseur  $\epsilon^0(\mathbf{r})$ , qui intervient dans l'équation (2.12), est le tenseur des déformations propres locales. Il rend compte des déformations locales introduites par la présence de lacunes d'une part et des dislocations d'autre part. La définition de la déformation libre  $\epsilon^0(\mathbf{r})$  comprend ainsi deux contributions :

$$\epsilon_{ij}^0 = \underbrace{\epsilon_{ij}^{0,d} h(\phi)}_1 + \underbrace{\epsilon_{ij}^{0,v} c}_2 \quad (2.18)$$

La première contribution est liée à la présence du cœur de la dislocation. Nous donnons ci-après l'expression de  $\epsilon^{0,d}$ , le tenseur des déformations propres induites par le cœur de la dislocation :

$$\epsilon_{ij}^{0,d} = \frac{1}{2} (b_i n_j + b_j n_i) \delta(x - x_0) \quad (2.19)$$

où  $\mathbf{b}$  est le vecteur de Burgers et  $\mathbf{n}$  la normale au plan de montée. Le champ  $\phi$  décrit une boucle de dislocation lacunaire. Celle-ci est contenue dans le plan  $x = x_0$ . Le tenseur  $\epsilon^{0,d}$  exprime donc une contraction locale dans le plan de montée dérivant d'un déplacement d'un vecteur de Burgers. Ce tenseur est pondéré par la présence effective de la plaquette de dislocation, soit  $h(\phi)$  (voir figure 2.2). La présence de lacunes dans la matrice induit également une déformation locale. Nous la posons, dans le terme 2, linéaire à la concentration [Geslin et al., 2014b]. L'expression de la déformation propre associée à une lacune isolée fait intervenir son volume de relaxation  $V^*$ . Elle s'écrit de la manière suivante :

$$\epsilon_{ij}^{0,v} = \delta_{ij} \frac{1}{3} \frac{V^*}{\Omega} \quad (2.20)$$

où  $\delta_{ij}$  est le symbole de Kronecker et où nous rappelons que  $\Omega$  est le volume atomique. En agrégeant les équations (2.18) à (2.20), nous obtenons l'expression détaillée du tenseur des déformations propres locales :

$$\epsilon_{ij}^0 = \frac{1}{2} (b_i n_j + b_j n_i) \delta(x - x_0) h(\phi) + \delta_{ij} \frac{1}{3} \frac{V^*}{\Omega} c \quad (2.21)$$

$C_{ijkl}(\eta)$  est le tenseur des constantes élastiques. Dans un pore, ie lorsque  $\eta = 1$ , les constantes élastiques doivent être nulles. Nous définissons donc  $C_{ijkl}(\eta)$  de la manière suivante :

$$C_{ijkl}(\eta) = C_{ijkl}(1 - h(\eta)) \quad (2.22)$$

où  $C_{ijkl}$  est le tenseur élastique dans la matrice.

Nous définissons enfin une déformation élastique  $\underline{\epsilon}^{\text{el}}(\mathbf{r})$ , différence entre la déformation totale  $\underline{\epsilon}(\mathbf{r})$  et la déformation libre  $\underline{\epsilon}^0(\mathbf{r})$  :

$$\underline{\epsilon}^{\text{el}}(\mathbf{r}) = \underline{\epsilon}(\mathbf{r}) - \underline{\epsilon}^0(\mathbf{r}) \quad (2.23)$$

Nous retrouvons ainsi la loi de Hooke, valable dans le cas des petites déformations et dans laquelle la contrainte locale  $\underline{\sigma}(\mathbf{r})$  est liée linéairement à la déformation élastique locale  $\underline{\epsilon}^{\text{el}}(\mathbf{r})$  par le tenseur d'élasticité  $\underline{\mathbb{C}}(\mathbf{r})$  :

$$\sigma_{ij}(\mathbf{r}) = \frac{\partial f_{\text{elas}}}{\partial \epsilon_{ij}^{\text{el}}}(\mathbf{r}) = C_{ijkl}(\mathbf{r}) \epsilon_{kl}^{\text{el}}(\mathbf{r}) \quad (2.24)$$

### Bilan

Nous avons défini une énergie libre  $\mathcal{F}(\{c\}, \{\phi\}, \{\eta\}, \{\underline{\epsilon}\}) = \int_V f_{\text{tot}} dV$ .

$$\begin{aligned} f_{\text{tot}} = & \frac{k_B T}{2\Omega c_0} \left( (D-1)h(\eta) + 1 \right) \left( c - c_0(1 - h(\eta)) \right)^2 & f_{\text{chem}} \\ & + \frac{12\gamma_p}{w_p} \eta^2 (1 - \eta)^2 + \frac{3}{4} \gamma_p w_p |\nabla \eta|^2 & f_{\text{pore}} \\ & + \left( \frac{\pi \Gamma_d}{8w_d} (1 - \cos(2\pi\phi)) + \frac{\pi}{4} \Gamma_d w_d |\mathbf{n} \wedge \nabla \phi|^2 \right) \delta(x - x_0) & f_{\text{dislo}} \\ & + \frac{1}{2} C_{ijkl} (1 - h(\eta)) [\epsilon_{ij} - \epsilon_{ij}^0(\phi, c)] [\epsilon_{kl} - \epsilon_{kl}^0(\phi, c)] - \sigma_{ij}^A \bar{\epsilon}_{ij} & f_{\text{elas}} \end{aligned} \quad (2.25)$$

### 2.1.3 Cinétique

Nous venons de construire l'énergie libre  $\mathcal{F}$  d'un système composé de pores, de boucles de dislocation et de lacunes, en prenant en compte une contribution élastique induite par la présence de ces objets. L'ensemble des champs  $\eta$ ,  $\phi$ ,  $c$  et  $\underline{\epsilon}$ , qui représentent les pores, les boucles de dislocations, la concentration en lacune et la déformation totale locale respectivement, évoluent de manière à dissiper cette énergie. Nous détaillons à présent l'évolution couplée de ces champs. Nous détaillons dans un premier temps les cinétiques des champs  $\Psi$ ,  $\phi$  et  $\eta$ . Puis nous en déduisons les cinétiques des champs  $c$ ,  $\phi$  et  $\eta$ . Nous décrivons enfin la résolution de l'équilibre mécanique.

### 2.1.3.1 Cinétiques des champs $\Psi$ , $\eta$ et $\phi$

La forme des équations cinétiques des champs dépend des caractères conservés ou non de ces champs. Nous avons vu plus haut que le champ  $\Psi$ , combinaison linéaire des champs  $c$ ,  $\phi$  et  $\eta$  (voir [équation \(2.3\)](#)) est conservé, tandis que les champs  $\phi$  et  $\eta$  ne le sont pas. En notant  $\mathcal{F}^*$  ( $\{\Psi\}, \{\phi\}, \{\eta\}, \{\underline{\epsilon}\}$ ) la fonctionnelle d'énergie qui représente l'énergie totale en fonction des champs  $\Psi$ ,  $\phi$ ,  $\eta$  et  $\underline{\epsilon}$ , nous avons donc les cinétiques suivantes :

$$\begin{cases} \dot{\Psi} = \nabla \cdot \left( M \nabla \frac{\delta \mathcal{F}^*}{\delta \Psi} \right), & (2.26) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \dot{\phi} = -L_\phi \frac{\delta \mathcal{F}^*}{\delta \phi}, & (2.27) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \dot{\eta} = -L_\eta \frac{\delta \mathcal{F}^*}{\delta \eta}, & (2.28) \end{cases}$$

où  $M$  est la mobilité du champ  $\Psi$  et peut en toute rigueur dépendre de la valeur locale de celui-ci. La signification physique de cette mobilité est commentée par la suite. Les termes  $L_\phi$  et  $L_\eta$  sont les mobilités des champs  $\phi$  et  $\eta$  respectivement.

$\mathcal{F}^*$  est reliée à la fonctionnelle  $\mathcal{F}$  présentée plus haut de la manière suivante :

$$\mathcal{F}^* (\{\Psi\}, \{\phi\}, \{\eta\}, \{\underline{\epsilon}\}) = \mathcal{F} (\{c\}, \{\phi\}, \{\eta\}, \{\underline{\epsilon}\}), \quad (2.29)$$

avec

$$\Psi(x, y, z) = b \phi(y, z) \delta(x - x_0) + c(x, y, z) + \eta(x, y, z). \quad (2.30)$$

En d'autres termes, nous avons :

$$\mathcal{F}^* (\{\Psi\}, \{\phi\}, \{\eta\}, \{\underline{\epsilon}\}) = \int_V f_{\text{tot}} (\Psi - b \phi(y, z) \delta(x - x_0) - \eta, \phi, \eta, \underline{\epsilon}) dV, \quad (2.31)$$

où la densité  $f_{\text{tot}}$  est donnée par l'[équation \(2.25\)](#). Les forces motrices qui interviennent dans les [équations \(2.26\) à \(2.28\)](#) sont donc données par :

$$\frac{\delta \mathcal{F}^*}{\delta \Psi} = \frac{\partial f_{\text{tot}}}{\partial c}, \quad (2.32)$$

$$\frac{\delta \mathcal{F}^*}{\delta \eta} = \frac{\partial f_{\text{tot}}}{\partial \eta} - \nabla \frac{\partial f_{\text{tot}}}{\partial \nabla \eta} - \frac{\partial f_{\text{tot}}}{\partial c}, \quad (2.33)$$

$$\frac{\delta \mathcal{F}^*}{\delta \phi} = \int_{L_x} \left\{ \frac{\partial f_{\text{tot}}}{\partial \phi} - \nabla \frac{\partial f_{\text{tot}}}{\partial \nabla \phi} - b \frac{\partial f_{\text{tot}}}{\partial c} \delta(x - x_0) \right\} dx, \quad (2.34)$$

où nous avons tenu compte du fait que la densité  $f_{\text{tot}}$  dépend également des gradients des champs  $\phi$  et  $\eta$  (voir [équation \(2.25\)](#)). Remarquons que, en raison du caractère bi-dimensionnel du champ  $\phi$  (voir [équation \(2.1\)](#)), la force motrice  $\delta \mathcal{F}^* / \delta \phi$  laisse une intégrale le long de la direction perpendiculaire au plan dans lequel le champ  $\phi$  est confiné.

### 2.1.3.2 Cinétiques des champs $c$ , $\eta$ et $\phi$

Nous souhaitons désormais ré-écrire ces équations en fonction des variables naturelles  $c$ ,  $\phi$  et  $\eta$ . Nous reprenons dans un premier temps l'[équation \(2.3\)](#). Elle nous permet d'avoir une expression de  $c$



en fonction des autres champs :

$$c(\mathbf{r}, t) = \Psi(\mathbf{r}, t) - b \phi(y, z, t) \delta(x - x_0) - \eta(\mathbf{r}, t) \quad (2.35)$$

Il suffit maintenant de dériver cette relation par rapport au temps et d'y injecter les équations (2.26) à (2.28). Nous obtenons ainsi la cinétique de  $c(\mathbf{r}, t)$  :

$$\dot{c} = \nabla \cdot \left( M \nabla \frac{\delta \mathcal{F}^*}{\delta \Psi} \right) + b L_\phi \frac{\delta \mathcal{F}^*}{\delta \phi} \delta(x - x_0) + L_\eta \frac{\delta \mathcal{F}^*}{\delta \eta} \quad (2.36)$$

Finalement, en utilisant les forces motrices données dans les équations (2.32) à (2.34) et les équations cinétiques équations (2.27), (2.28) et (2.36), nous obtenons :

$$\begin{cases} \dot{c} = \nabla \cdot \left( M \nabla \frac{\partial f_{\text{tot}}}{\partial c} \right) - b \delta(x - x_0) \dot{\phi} - \dot{\eta}, & (2.37) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \dot{\phi} = -L_\phi \left( \int_{L_x} \frac{\partial f_{\text{tot}}}{\partial \phi} dx - \frac{\pi}{2} \Gamma_d w_d \nabla_{yz}^2 \phi - b \frac{\partial f_{\text{tot}}}{\partial c} \Big|_{x=x_0} \right), & (2.38) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \dot{\eta} = -L_\eta \left( \frac{\partial f_{\text{tot}}}{\partial \eta} - \frac{3}{2} \gamma_p w_p \nabla^2 \eta - \frac{\partial f_{\text{tot}}}{\partial c} \right), & (2.39) \end{cases}$$

où nous avons défini  $\nabla_{yz}^2$  comme le laplacien planaire selon les direction  $\mathbf{y}$  et  $\mathbf{z}$ . Nous faisons ici remarquer que l'équation (2.38), à deux dimensions seulement, est en accord avec la définition planaire de  $\phi$ . Comme nous l'avons vu plus haut,  $f_{\text{tot}} = f_{\text{chem}} + f_{\text{pore}} + f_{\text{dislo}} + f_{\text{elas}}$ . Nous explicitons ci-après les dérivées partielles intervenant dans les équations (2.37) à (2.39) :

$$\frac{\partial f_{\text{chem}}}{\partial c} = \mu_{\text{chem}} = \frac{k_B T}{\Omega} \left( (D-1) h(\eta) + 1 \right) \left( \frac{c}{c_0} + h(\eta) - 1 \right) \quad (2.40)$$

$$\frac{\partial f_{\text{elas}}}{\partial c} = -\sigma_{ij} \epsilon_{ij}^{0,v} \quad (2.41)$$

$$\frac{\partial f_{\text{chem}}}{\partial \eta} = \frac{k_B T}{\Omega} c_0 h'(\eta) \left( \frac{c}{c_0} + h(\eta) - 1 \right) \left( 2(D-1) h(\eta) + 2 - D + (D-1) \frac{c}{c_0} \right) \quad (2.42)$$

$$\frac{\partial f_{\text{pore}}}{\partial \eta} = \frac{24 \gamma_p}{w_p} (\eta - 3\eta^2 + 2\eta^3) \quad (2.43)$$

$$\frac{\partial f_{\text{elas}}}{\partial \eta} = -\frac{1}{2} C_{ijkl} h'(\eta) [\epsilon_{ij} - \epsilon_{ij}^0(\phi, c)] [\epsilon_{kl} - \epsilon_{kl}^0(\phi, c)] \quad (2.44)$$

$$\frac{\partial f_{\text{dislo}}}{\partial \phi} = \frac{\pi^2 \Gamma_d}{4w_d} \sin(2\pi\phi) \delta(x - x_0) \quad (2.45)$$

$$\frac{\partial f_{\text{elas}}}{\partial \phi} = -\frac{\sigma_{ij}}{2} (b_i n_j + b_j n_i) \delta(x - x_0) h'(\phi) \quad (2.46)$$

Tous calculs faits, nous obtenons le jeu d'équations cinétiques couplées suivant :

$$\dot{c} = \nabla \cdot \left( M \nabla \frac{\partial f_{\text{tot}}}{\partial c} \right) - b \delta(x - x_0) \dot{\phi} - \dot{\eta}, \quad (2.47)$$

$$\begin{aligned} \dot{\phi} = -L_\phi \left( \frac{\pi^2 \Gamma_d}{4w_d} \sin(2\pi\phi) - \frac{\sigma_{ij}}{2} (b_i n_j + b_j n_i) h'(\phi) - \frac{\pi}{2} \Gamma_d w_d \nabla_{yz}^2 \phi \right. \\ \left. - b \left[ \frac{k_B T}{\Omega} \left( (D-1) h(\eta(x_0, y, z)) + 1 \right) \left( \frac{c(x_0, y, z)}{c_0} + h(\eta(x_0, y, z)) - 1 \right) \right. \right. \\ \left. \left. - \sigma_{ij}(x_0, y, z) \epsilon_{ij}^{0,v} \right] \right), \quad (2.48) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \dot{\eta} = -L_\eta \left( \frac{24\gamma_p}{w_p} (\eta - 3\eta^2 + 2\eta^3) - \frac{C_{ijkl}}{2} h'(\eta) \epsilon_{ij}^{\text{el}} \epsilon_{kl}^{\text{el}} \right. \\ \left. + \frac{k_B T}{\Omega} c_0 h'(\eta) \left( \frac{c}{c_0} + h(\eta) - 1 \right) \left( (D-1) \left( 2h(\eta) + \frac{c}{c_0} \right) + 2 - D \right) \right. \\ \left. - \frac{3}{2} \gamma_p w_p \nabla^2 \eta - \frac{k_B T}{\Omega} \left( (D-1) h(\eta) + 1 \right) \left( \frac{c}{c_0} + h(\eta) - 1 \right) + \sigma_{ij} \epsilon_{ij}^{0,v} \right). \quad (2.49) \end{aligned}$$

Nous pouvons maintenant donner un sens physique à  $M$ , initialement introduit dans l'équation (2.26). L'équation (2.37) montre qu'il s'agit de la mobilité des lacunes. Afin de compenser les divergences logarithmiques et de retrouver l'équation de Fick pour  $c \rightarrow 0$  lorsque le potentiel chimique dérive de l'équation (2.5), la mobilité est exprimée comme suit [Geslin, 2013] :

$$M = M(c) = \frac{\Omega D_v}{k_B T} c(1-c) \quad \text{où} \quad D_v = D_0 \exp\left(-\frac{E_m}{k_B T}\right) \quad (2.50)$$

$D_v$  [ $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ ] est le coefficient de diffusion des lacunes,  $D_0$  [ $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ ] est un préfacteur intrinsèque au matériau constituant la matrice [Ehrhart *et al.*, 1991] et  $E_m$  [eV] est l'énergie de migration des lacunes. Dans le cadre de notre étude, nous rappelons que nous supposons une solution diluée où la concentration en lacunes  $c$  s'éloigne peu de sa valeur d'équilibre  $c_0 \ll 1$ . Par conséquent, nous définissons la mobilité  $M$ , constante, comme suit :

$$M = \frac{\Omega D_v}{k_B T} c_0 \quad (2.51)$$

L'équation (2.37) s'écrit donc désormais de la façon suivante :

$$\dot{c} = M \nabla^2 \frac{\partial f_{\text{tot}}}{\partial c} - b \delta(x - x_0) \dot{\phi} - \dot{\eta} \quad (2.52)$$

### 2.1.3.3 Équilibre mécanique

Dans le cadre de l'étude de phénomènes diffusifs comme c'est le cas ici, le temps caractéristique d'établissement de l'équilibre mécanique est petit devant le temps caractéristique de la diffusion, de telle sorte que l'équilibre mécanique statique de la microstructure est vérifié à chaque instant. Nous écrivons l'énergie élastique comme l'intégrale sur le volume  $V$  de la densité d'énergie élastique  $f_{\text{elas}}$  définie

équation (2.12). Cette énergie dépend de la déformation homogène  $\bar{\epsilon}$  et des déplacements hétérogènes  $\delta\mathbf{u}(\mathbf{r})$  au travers de la déformation hétérogène  $\delta\epsilon(\mathbf{r})$  :

$$\mathcal{F}^{\text{el}} = \frac{1}{2} \int_V \left\{ C_{ijkl}(\mathbf{r}) \left[ \bar{\epsilon}_{ij} + \delta\epsilon_{ij}(\mathbf{r}) - \epsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \right] \left[ \bar{\epsilon}_{kl} + \delta\epsilon_{kl}(\mathbf{r}) - \epsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) \right] \right\} dV - V \sigma_{ij}^A \bar{\epsilon}_{ij}. \quad (2.53)$$

Considérons désormais une variation  $\Delta\mathcal{F}^{\text{el}}$  induite par des variations  $\Delta\bar{\epsilon}$  et  $\Delta\delta\mathbf{u}(\mathbf{r})$ . Par des arguments de symétrie et en intégrant par parties les termes en facteur de  $\Delta\delta\mathbf{u}(\mathbf{r})$ , nous aboutissons à la relation suivante :

$$\Delta\mathcal{F}^{\text{el}} = \int_V \left\{ C_{ijkl}(\mathbf{r}) \left[ \bar{\epsilon}_{kl} + \delta\epsilon_{kl}(\mathbf{r}) - \epsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) \right] \Delta\bar{\epsilon}_{ij} - \frac{\partial}{\partial r_j} \left( C_{ijkl}(\mathbf{r}) \left[ \bar{\epsilon}_{kl} + \delta\epsilon_{kl}(\mathbf{r}) - \epsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) \right] \right) \Delta\delta u_i(\mathbf{r}) \right\} dV - V \sigma_{ij}^A \Delta\bar{\epsilon}_{ij}. \quad (2.54)$$

En regroupant les termes facteurs de  $\Delta\bar{\epsilon}$  et ceux facteurs  $\Delta\delta\mathbf{u}(\mathbf{r})$ , nous pouvons en déduire les dérivées fonctionnelles de  $\mathcal{F}^{\text{el}}$  par rapport à  $\bar{\epsilon}$  et  $\delta\mathbf{u}(\mathbf{r})$  :

$$\frac{\Delta\mathcal{F}^{\text{el}}}{\Delta\bar{\epsilon}_{ij}} = \int_V \sigma_{ij}(\mathbf{r}) dV - V \sigma_{ij}^A, \quad (2.55)$$

$$\frac{\Delta\mathcal{F}^{\text{el}}}{\Delta\delta u_i(\mathbf{r})} = -\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial r_j}(\mathbf{r}), \quad (2.56)$$

où la contrainte  $\sigma_{ij}(\mathbf{r})$  est donnée par :

$$\sigma_{ij}(\mathbf{r}) = C_{ijkl}(\mathbf{r}) \left[ \bar{\epsilon}_{kl} + \delta\epsilon_{kl}(\mathbf{r}) - \epsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) \right]. \quad (2.57)$$

L'équilibre mécanique est atteint lorsque ces variations sont nulles, soit :

$$\left\{ \int_V \sigma_{ij}(\mathbf{r}) dV - V \sigma_{ij}^A = 0 \right. \quad (2.58)$$

$$\left. \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial r_j}(\mathbf{r}) = 0 \right\} \quad (2.59)$$

Nous retrouvons que, à l'équilibre, la moyenne spatiale de la contrainte doit être égale à la contrainte appliquée et que la divergence de la contrainte locale doit être nulle. En définissant  $\underline{\underline{C}}(\mathbf{r})$  comme la somme d'un tenseur élastique d'un milieu homogène de référence  $\underline{\underline{C}}^{\text{ref}}$  et d'un tenseur élastique d'un milieu inhomogène  $\underline{\underline{C}}'(\mathbf{r})$  tel que :

$$C_{ijkl}(\mathbf{r}) = C_{ijkl}^{\text{ref}} + C'_{ijkl}(\mathbf{r}) \quad (2.60)$$

et en introduisant le tenseur des souplesses du milieu de référence  $\underline{\underline{S}}^{\text{ref}}$  défini par  $S_{ijkl}^{\text{ref}} C_{klmn}^{\text{ref}} = \frac{1}{2}(\delta_{in}\delta_{jm} + \delta_{im}\delta_{jn})$ , où  $\delta$  est le symbole de Kronecker, nous remanions les équations (2.58) et (2.59) pour obtenir le système suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \bar{\epsilon}_{ij} = \langle \epsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \rangle + S_{ijkl}^{\text{ref}} \left[ \sigma_{kl}^A + \langle C'_{klmn}(\mathbf{r}) \epsilon_{mn}^0(\mathbf{r}) \rangle - \langle C'_{klmn}(\mathbf{r}) \delta\epsilon_{mn}(\mathbf{r}) \rangle - \langle C'_{klmn}(\mathbf{r}) \rangle \bar{\epsilon}_{mn} \right] \end{array} \right. \quad (2.61)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \left[ C_{ijkl}^{\text{ref}} \frac{\partial}{\partial r_j} \frac{\partial}{\partial r_l} + \frac{\partial}{\partial r_j} \left( C'_{ijkl}(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial r_l} \right) \right] \delta u_k(\mathbf{r}) \\ = C_{ijkl}^{\text{ref}} \frac{\partial \epsilon_{kl}^0}{\partial r_j}(\mathbf{r}) - \frac{\partial C'_{ijkl}(\mathbf{r})}{\partial r_j} \bar{\epsilon}_{kl} + \frac{\partial C'_{ijkl} \epsilon_{kl}^0}{\partial r_j}(\mathbf{r}) \end{array} \right. \quad (2.62)$$

Résoudre l'équilibre mécanique de la microstructure revient à trouver  $\bar{\xi}$  et  $\delta\mathbf{u}(\mathbf{r})$  solutions du système ainsi présenté. Cette résolution est simplifiée dans l'espace de Fourier, où les opérateurs différentiels deviennent locaux. Nous rappelons ci-après la définition d'une transformation de Fourier et d'une transformation inverse :

$$\mathcal{F}\{f(\mathbf{r})\} = f(\mathbf{k}) = \{f\}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{V} \int_V f(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} dV \quad (2.63)$$

$$\mathcal{F}^{-1}\{f(\mathbf{k})\} = f(\mathbf{r}) = \{f\}_{\mathbf{r}} = \sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad (2.64)$$

où  $\mathbf{k}$  est un vecteur de l'espace réciproque. Pour simplifier les notations on différencie la transformée de Fourier de sa fonction par son argument, respectivement  $\mathbf{k}$  ou  $\mathbf{r}$ .

Le système composé des équations (2.61) et (2.62) possède une solution analytique lorsque le milieu élastique est homogène [Khachaturyan, 1983]. Il s'agit d'un milieu où les constantes élastiques ne dépendent pas de la position dans l'espace, ie  $\underline{C}(\mathbf{r}) = \underline{C}$  d'où  $\underline{C}'(\mathbf{r}) = \underline{0}$ .

Lorsque le milieu élastique est inhomogène, ce qui est le cas dans notre thèse où un pore aux constantes élastiques nulles s'insère dans une matrice aux constantes élastiques non nulles, il est possible de trouver une solution numérique aux équations (2.61) et (2.62). Nous décrivons très brièvement l'algorithme numérique employé dans nos travaux de thèse, très similaire à Degeiter [2019]. Les équations (2.61) et (2.62) sont résolues à l'aide d'un algorithme de point fixe. Présenté pour la première fois par Moulinec et Suquet [1995] et Khachaturyan *et al.* [1995], ce type d'algorithme tire parti de l'efficacité numérique des Transformées de Fourier Rapide (FFT), largement optimisées et parallélisées. Il est donc nécessaire de disposer d'une grille régulière. De nombreux travaux reprennent cet algorithme ou des dérivés [Hu et Chen, 2001; Michel *et al.*, 2001; Boussinot *et al.*, 2010; Willot, 2015; Cottura *et al.*, 2015; Degeiter *et al.*, 2020].

Les valeurs de  $\bar{\xi}$  et  $\delta\mathbf{u}(\mathbf{r})$  sont approchées par itérations jusqu'à satisfaire un critère de convergence défini au préalable, où elles sont alors solutions des équations (2.61) et (2.62) dans la précision choisie. Dans notre cas, nous vérifions que la norme infinie de la divergence des contraintes  $\|\tilde{\nabla} \cdot \underline{\sigma}\|_{\infty}$ , où l'opérateur  $\tilde{\nabla} \cdot$  représente la discrétisation de l'opérateur divergence  $\nabla \cdot$ , est inférieure à  $10^{-3}C_{44}$ , où  $C_{44}$  est le coefficient de cisaillement en notation de Voigt. Les champs  $\bar{\xi}$  et  $\delta\mathbf{u}(\mathbf{r})$  sont donc solutions des équations (2.61) et (2.62) de sorte que toutes les composantes de la contrainte  $\underline{\sigma}$ , sur tout le volume, sont précises à  $10^{-3}C_{44}$  près, soit une précision de l'ordre du MPa en pratique, ce qui est tout à fait suffisant. La vitesse de convergence de l'algorithme dépend du milieu homogène de référence  $\underline{C}^{\text{ref}}$ , du contraste de raideur et de la proximité de l'initialisation de  $\bar{\xi}$  et  $\delta\mathbf{u}(\mathbf{r})$  à la solution dans le point fixe. Lorsque l'inhomogénéité de la microstructure est faible, il est usuel d'initialiser  $\bar{\xi}$  et  $\delta\mathbf{u}(\mathbf{r})$  aux solutions analytiques de l'élasticité homogène. Dans notre cas, nous prenons comme milieu de référence un milieu homogène dont les constantes élastiques sont celles de la matrice multipliées par un indicateur lié à la porosité de la microstructure, soit  $\underline{C}^{\text{ref}} = (1 - \rho_v)\underline{C}^{\text{mat}}$  où  $\rho_v = V_{\text{pores}}/V_{\text{tot}}$  est la porosité. L'initialisation du point fixe est alors faite en prenant pour  $\bar{\xi}$  et  $\delta\mathbf{u}(\mathbf{r})$  les solutions analytiques de ce milieu de référence homogène.

Tout l'enjeu dans l'implémentation de tels algorithmes réside dans la construction du schéma FFT approprié et des opérateurs différentiels associés. Ces opérateurs, locaux dans l'espace réciproque, peuvent être définis à partir d'opérateurs de différences finies dans l'espace direct. Il est montré dans Willot [2015] que les schémas FFT classiques peuvent conduire les champs mécaniques à osciller en présence d'interfaces étroites. Ces artefacts numériques peuvent être supprimés par l'utilisation de schémas avec des grilles décalées, dont il existe plusieurs versions [Geslin, 2013; Ruffini et Finel, 2015; Ruffini *et al.*, 2017; Valdenaire, 2016]. La stabilité d'un schéma est alors assurée pourvu qu'il n'existe pas de vecteur d'onde  $\mathbf{k} \neq 0$ , dans la 1<sup>ère</sup> zone de Brillouin associée à la grille, qui annule simultanément les opérateurs différentiels. Dans le cadre de notre étude, nous utilisons un choix de discrétisation récemment proposé par Alphonse Finel (publication à venir). Il s'agit d'un solveur discret, inconditionnellement stable quelles que soient les discontinuités matérielles présentes, et numériquement très efficace.

#### 2.1.4 Conclusion

Nous venons de construire un modèle champ de phase qui couple évolution de cavités, diffusion de lacunes et montée de dislocations. Nous avons défini les champs d'intérêt et avons associé à notre système une énergie. Pour dissiper cette énergie, une loi de conservation sur les lacunes fait naturellement émerger une évolution cinétique couplée des différents champs. Les interactions élastiques sont également prises en compte. Les équations du modèle sont exprimées ici dans un milieu continu. Dans la partie qui suit, nous détaillons la manière dont nous les discrétisons et effectuons l'implémentation numérique.

## 2.2 Implémentation numérique

Dans cette section nous détaillons l'implémentation numérique de notre modèle. Dans un premier temps nous explicitons nos choix d'adimensionnement. Puis nous mettons en place une solution numérique pour décrire l'évolution des champs  $c$ ,  $\phi$  et  $\eta$ . Nous présentons en outre une démarche inédite pour décrire l'évolution du champ de concentration des lacunes  $c$  inspirée d'hypothèses physiques simplificatrices.

### 2.2.1 Adimensionnement

Nous réalisons ci-après l'inventaire des grandeurs qui caractérisent notre modèle, en terme d'espace, de temps et d'énergie. Nous utilisons ensuite ces grandeurs pour adimensionner les paramètres physiques de notre modèle de manière à en optimiser l'implémentation numérique. Les choix que nous faisons sont semblables à ceux faits dans Geslin *et al.* [2014b] et Rokkam *et al.* [2009], avec toutefois des différences, que nous expliquons maintenant.

L'implémentation numérique impose une discrétisation spatiale de notre modèle continu sur une grille. Nous choisissons ici une grille cubique et nous appelons  $d$  [m] son pas, longueur caractéristique

de notre modèle. Nous nous laissons libres de choisir cette distance en fonction de la simulation que nous réalisons. Contrairement à [Geslin et al. \[2014b\]](#) ou [Rokkam et al. \[2009\]](#), elle n'est pas forcément liée à un paramètre de maille ni ne découle d'un phénomène physique particulier. Ce choix nous permet en particulier de simuler des cavités de tailles nanométriques en fixant  $d$  sub-ångströmique ou bien de simuler des pores de tailles micrométriques en fixant  $d$  de l'ordre de la centaine de nanomètre. Aux coordonnées  $(x, y, z)$  de l'espace continu est associé le triplet  $(l, m, n)$  de la grille numérique. Les boucles prismatiques deviennent des plaquettes d'épaisseur  $d$  [[Geslin et al., 2014b](#)]. La fonction de Dirac  $\delta(x)$  trouve son équivalent discret dans une fonction créneau  $H(l)$  de largeur le pas de grille  $d$ , soit  $\delta(x) \rightarrow H(l)/d$ . Nous ne discrétisons pas les opérateurs différentiels mais préférons employer leur équivalent local dans l'espace réciproque dans lequel nous nous plaçons pour la résolution des [équations \(2.26\) à \(2.28\)](#). Cette transposition directe d'un opérateur réel continu par son équivalent toujours continu dans l'espace réciproque discrétisé dans le cadre d'un schéma FFT discret peut être à l'origine d'oscillations liées à du frottement sur la grille, notamment lorsque les interfaces sont abruptes [[Finel et al., 2018](#)]. Nous nous assurons dans chacune de nos simulations que les zones interfaciques des champs sont bien décrites par un nombre assez important de points de grille (minimum 6) de manière à s'affranchir de ce problème.

Nous adoptons comme temps caractéristique de nos équations d'évolution  $\tau = d^2/D_v c_0$ , basé sur le temps de diffusion d'une lacune sur la distance  $d$ ,  $t_0 = d^2/D_v$ . En adimensionnant les énergies par l'énergie caractéristique  $f_0 = k_B T/\Omega$ , le choix d'adimensionner le temps par  $\tau$ , lié à la diffusion des lacunes, mène logiquement à une mobilité des lacunes adimensionnée  $\tilde{M} = 1$ . Nous ne faisons donc plus apparaître  $\tilde{M}$  dans les équations qui suivent.

Nous adimensionnons les différentes quantités physiques de l'[équation \(2.25\)](#). Ces quantités adimensionnées sont notées  $\tilde{\square}$  et sont récapitulées dans le [tableau 2.1](#). Nous introduisons les quantités adimensionnées du [tableau 2.1](#) dans les dérivées partielles des [équations \(2.40\) à \(2.46\)](#) intervenant dans les forces motrices. Nous obtenons les relations suivantes :

$$\frac{\partial f_{\text{chem}}}{\partial c} = \mu_{\text{chem}} = f_0 \left( (D-1)h(\eta) + 1 \right) \left( \tilde{c} + h(\eta) - 1 \right) \quad (2.65)$$

$$\frac{\partial f_{\text{elas}}}{\partial c} = -f_0 \tilde{\sigma}_{ij} \tilde{\epsilon}_{ij}^{0,v} \quad (2.66)$$

$$\frac{\partial f_{\text{chem}}}{\partial \eta} = f_0 c_0 h'(\eta) \left( \tilde{c} + h(\eta) - 1 \right) \left( 2(D-1)h(\eta) + 2 - D + (D-1)\tilde{c} \right) \quad (2.67)$$

$$\frac{\partial f_{\text{pore}}}{\partial \eta} = f_0 \frac{2A\tilde{\gamma}_p}{\tilde{w}_p} (\eta - 3\eta^2 + 2\eta^3) \quad (2.68)$$

$$\frac{\partial f_{\text{elas}}}{\partial \eta} = -f_0 \frac{\tilde{C}_{ijkl}}{2} h'(\eta) \left[ \tilde{\epsilon}_{ij} - \tilde{\epsilon}_{ij}^0(\phi, c) \right] \left[ \tilde{\epsilon}_{kl} - \tilde{\epsilon}_{kl}^0(\phi, c) \right] \quad (2.69)$$

$$\frac{\partial f_{\text{dislo}}}{\partial \phi} = f_0 d \frac{\pi^2 \tilde{\Gamma}_d \tilde{C}_{44} \tilde{b}^2}{4\tilde{w}_d} \sin(2\pi\phi) \frac{1}{d} H(l - l_0) \quad (2.70)$$

$$\frac{\partial f_{\text{elas}}}{\partial \phi} = -f_0 d \frac{\tilde{\sigma}_{ij}}{2} \left( \tilde{b}_i n_j + \tilde{b}_j n_i \right) h'(\phi) \frac{1}{d} H(l - l_0) \quad (2.71)$$

Nous obtenons ainsi, à partir des [équations \(2.37\) à \(2.39\)](#) le jeu d'équations cinétiques adimensionnées

TABLEAU 2.1 – Adimensionnement et discrétisation du modèle.

<b>Opérateurs et fonctions</b>		
$\delta(x) \rightarrow \frac{1}{d} \mathbf{H}(l)$	$\tilde{\nabla} = d\nabla$	$\tilde{\nabla}^2 = d^2\nabla^2$
<b>Cavités</b>		
$\tilde{w}_p = \frac{w_p}{d}$		$\tilde{\gamma}_p = \frac{\gamma_p}{f_0 d}$
<b>Dislocations</b>		
$\tilde{b} = \frac{b}{d}$	$\tilde{w}_d = \frac{w_d}{d}$	$\tilde{\Gamma}_d = \frac{\Gamma_d}{C_{44}b^2}$
<b>Lacunes</b>		
	$\tilde{c} = \frac{c}{c_0}$	
<b>Longueurs et déformations</b>		
$\tilde{\mathbf{u}} = \frac{\mathbf{u}}{d}$	$\tilde{\mathbf{r}} = \frac{\mathbf{r}}{d}$	$\boldsymbol{\varepsilon} = \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}$
<b>Temps et énergie</b>		
$\tilde{t} = t \frac{D_v c_0}{d^2}$	$\tilde{f}_{\text{tot}} = \frac{f_{\text{tot}}}{f_0}$	$\tilde{C}_{ijkl} = \frac{C_{ijkl}}{f_0}$
<b>Mobilités</b>		
$\tilde{M} = 1$	$\tilde{L}_\phi = \frac{L_\phi d^3}{M}$	$\tilde{L}_\eta = \frac{L_\eta d^2}{M}$

suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dc}{d\tilde{t}} = \tilde{\nabla}^2 \left( \frac{\partial \tilde{f}_{\text{tot}}}{\partial c} \right) - \tilde{b} \frac{d\phi}{d\tilde{t}} \mathbf{H}(l - l_0) - \frac{d\eta}{d\tilde{t}} \end{array} \right. \quad (2.72)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\phi}{d\tilde{t}} = -\tilde{L}_\phi \left( \sum_{l=0}^{L_x} l \frac{\partial \tilde{f}_{\text{tot}}}{\partial \phi} - \tilde{b} \frac{\partial \tilde{f}_{\text{tot}}}{\partial c} \Big|_{l=l_0} - \frac{\pi}{2} \tilde{\Gamma}_d \tilde{C}_{44} \tilde{b}^2 \tilde{w}_d \tilde{\nabla}_{mn}^2 \phi \right) \end{array} \right. \quad (2.73)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\eta}{d\tilde{t}} = -\tilde{L}_\eta \left( \frac{\partial \tilde{f}_{\text{tot}}}{\partial \eta} - \frac{\partial \tilde{f}_{\text{tot}}}{\partial c} - \frac{3}{2} \tilde{\gamma}_p \tilde{w}_p \tilde{\nabla}^2 \eta \right) \end{array} \right. \quad (2.74)$$

## 2.2.2 Résolution des équations cinétiques et stratégie pour l'équilibre chimique

Nous détaillons ici l'implémentation numérique des équations (2.72) à (2.74) qui décrivent l'évolution temporelle des champs  $c$ ,  $\phi$  et  $\eta$ . La résolution de ces équations différentielles requiert un schéma de discrétisation temporelle avec un pas de temps  $\Delta\tilde{t}$ . Pour des raisons évidentes d'efficacité numérique, nous souhaitons  $\Delta\tilde{t}$  le plus grand possible dans la limite où le schéma est stable, *ie* les solutions ne divergent pas, et est suffisamment précis. C'est le phénomène physique le plus rapide qui fixe ce

pas de temps maximal admissible. Dans notre cas, il s'agit de la diffusion des lacunes. Toujours dans un souci d'efficacité numérique, nous résolvons les équations (2.72) à (2.74) dans l'espace réciproque, à l'aide des transformées de Fourier, dont nous avons déjà rappelé la définition section 2.1.3.3. Nous tirons ainsi parti de l'optimisation des bibliothèques FFT existantes mais également et surtout du caractère local des opérateurs différentiels dans cet espace. Les équations cinétiques deviennent alors des équations algébriques qui peuvent être résolues par un schéma d'Euler semi-implicite comme nous le détaillons ci-après. Même dans ce cas et avec l'adimensionnement choisi précédemment et dont les grandeurs caractéristiques sont celles de la diffusion des lacunes, le pas de temps maximum admissible est de l'ordre de  $0.1t_0$ , où nous rappelons que  $t_0 = d^2/D_v$  est le temps caractéristique de diffusion d'une lacune sur une distance  $d$ . Les temps de simulations réels simulables sont donc limités à quelques microsecondes [Geslin, 2013], loin des minutes ou des heures envisagées pour simuler convenablement des phénomènes de recuit ou de pressage isostatique à chaud [Jacquelin, 2018; Epishin et al., 2018]. Il est cependant un cas de figure où nous pouvons nous affranchir du traitement explicite de la diffusion. Il s'agit du cas où les objets autres que les lacunes évoluent très lentement par rapport à ces dernières. Dans ces situations-là uniquement, le champ  $c$  est considéré comme évoluant de manière quasi statique par rapport aux champs  $\eta$  et  $\phi$ . Cela se traduit par l'approximation  $\dot{c} = 0$ . Sous cette hypothèse, les équations (2.72) à (2.74) se ré-écrivent de la sorte :

$$\begin{cases} 0 = \tilde{\nabla}^2 \left( \frac{\partial \tilde{f}_{\text{tot}}}{\partial c} \right) - \tilde{b} \frac{d\phi}{d\tilde{t}} \text{H}(l - l_0) - \frac{d\eta}{d\tilde{t}} \end{cases} \quad (2.75)$$

$$\begin{cases} \frac{d\phi}{d\tilde{t}} = -\tilde{L}_\phi \left( \sum_{l=0}^{L_x} l \frac{\partial \tilde{f}_{\text{tot}}}{\partial \phi} - \tilde{b} \frac{\partial \tilde{f}_{\text{tot}}}{\partial c} \Big|_{l=l_0} - \frac{\pi}{2} \tilde{\Gamma}_d \tilde{C}_{44} \tilde{b}^2 \tilde{w}_d \tilde{\nabla}_{mn}^2 \phi \right) \end{cases} \quad (2.76)$$

$$\begin{cases} \frac{d\eta}{d\tilde{t}} = -\tilde{L}_\eta \left( \frac{\partial \tilde{f}_{\text{tot}}}{\partial \eta} - \frac{\partial \tilde{f}_{\text{tot}}}{\partial c} - \frac{3}{2} \tilde{\gamma}_p \tilde{w}_p \tilde{\nabla}^2 \eta \right) \end{cases} \quad (2.77)$$

Nous détaillons la résolution numérique de ces équations, en commençant par la résolution du champ  $\phi$ . La construction du schéma d'Euler semi-implicite dans l'espace réciproque passe par la stratégie suivante : tous les termes linéaires en  $\hat{\phi}$  sont considérés pris à  $\tilde{t} + \Delta\tilde{t}$ . Le reste des termes est considéré pris à  $\tilde{t}$ . Discrétisée en temps, l'équation (2.76) devient :

$$\begin{aligned} \frac{\hat{\phi}(\mathbf{k}, \tilde{t} + \Delta\tilde{t}) - \hat{\phi}(\mathbf{k}, \tilde{t})}{\Delta\tilde{t}} = & -\tilde{L}_\phi \left( \mathcal{F} \left\{ \sum_{l=0}^{L_x} l \frac{\partial \tilde{f}_{\text{tot}}}{\partial \phi} \right\}_{\tilde{t}} - \tilde{b} \mathcal{F} \left\{ \frac{\partial \tilde{f}_{\text{tot}}}{\partial c} \Big|_{l=l_0} \right\}_{\tilde{t}} \right. \\ & \left. + \frac{\pi}{2} \tilde{\Gamma}_d \tilde{C}_{44} \tilde{b}^2 \tilde{w}_d (k_m^2 + k_n^2) \hat{\phi}(\mathbf{k}, \tilde{t} + \Delta\tilde{t}) \right) \end{aligned} \quad (2.78)$$

où nous rappelons que  $\mathbf{k} = (k_l, k_m, k_n)$  est un vecteur de l'espace réciproque et où  $\hat{f} = f(\mathbf{k}) = \mathcal{F} \{f(\mathbf{r})\}$  désigne la transformée de Fourier de  $f(\mathbf{r})$  telle que définie dans les équations (2.63) et (2.64).  $\mathcal{F} \{f(\mathbf{r})\}_{\tilde{t}}$  désigne la transformée de Fourier prise à  $\tilde{t}$ . Nous obtenons ainsi l'expression du champ  $\hat{\phi}$ , en tout point  $\mathbf{k}$  de l'espace réciproque, et à  $\tilde{t} = \tilde{t} + \Delta\tilde{t}$  :

$$\hat{\phi}(\mathbf{k}, \tilde{t} + \Delta\tilde{t}) = \frac{\hat{\phi}(\tilde{t}) - \Delta\tilde{t} \tilde{L}_\phi \left( \mathcal{F} \left\{ \sum_{l=0}^{L_x} l \frac{\partial \tilde{f}_{\text{tot}}}{\partial \phi} \right\}_{\tilde{t}} - \tilde{b} \mathcal{F} \left\{ \frac{\partial \tilde{f}_{\text{tot}}}{\partial c} \Big|_{l=l_0} \right\}_{\tilde{t}} \right)}{1 + \Delta\tilde{t} \tilde{L}_\phi \frac{\pi}{2} \tilde{\Gamma}_d \tilde{C}_{44} \tilde{b}^2 \tilde{w}_d (k_m^2 + k_n^2)} \quad (2.79)$$



De la même façon, nous discrétisons en temps l'équation (2.77), qui gouverne l'évolution du champ  $\eta$  :

$$\begin{aligned} \frac{\hat{\eta}(\mathbf{k}, \tilde{t} + \Delta\tilde{t}) - \hat{\eta}(\mathbf{k}, \tilde{t})}{\Delta\tilde{t}} = & -\tilde{L}_\eta \left( \mathcal{F} \left\{ \frac{24\tilde{\gamma}_p}{\tilde{w}_p} \eta^2 (2\eta - 3) + \frac{\partial \tilde{f}_{\text{elas}}}{\partial \eta} - \frac{\partial \tilde{f}_{\text{tot}}}{\partial c} \right\}_{\tilde{t}} \right. \\ & \left. + \frac{24\tilde{\gamma}_p}{\tilde{w}_p} \hat{\eta}(\mathbf{k}, \tilde{t} + \Delta\tilde{t}) + \frac{3}{2} \tilde{\gamma}_p \tilde{w}_p \mathbf{k}^2 \hat{\eta}(\mathbf{k}, \tilde{t} + \Delta\tilde{t}) \right) \end{aligned} \quad (2.80)$$

Nous obtenons l'expression du champ  $\hat{\eta}$ , en tout point  $\mathbf{k}$  de l'espace réciproque, et à  $\tilde{t} = \tilde{t} + \Delta\tilde{t}$  :

$$\hat{\eta}(\mathbf{k}, \tilde{t} + \Delta\tilde{t}) = \frac{\hat{\eta}(\tilde{t}) - \Delta\tilde{t} \tilde{L}_\eta \mathcal{F} \left\{ \frac{24\tilde{\gamma}_p}{\tilde{w}_p} \eta^2 (2\eta - 3) + \frac{\partial \tilde{f}_{\text{elas}}}{\partial \eta} - \frac{\partial \tilde{f}_{\text{tot}}}{\partial c} \right\}_{\tilde{t}}}{1 + \Delta\tilde{t} \tilde{L}_\eta \frac{3}{2} \tilde{\gamma}_p \left( \frac{16}{\tilde{w}_p} + \tilde{w}_p \mathbf{k}^2 \right)} \quad (2.81)$$

Nous abordons enfin le traitement spécifique de l'équation (2.75), écrite dans l'hypothèse où le champ  $c$  évolue de manière quasi statique par rapport aux autres champs. Pour résoudre l'équation  $\dot{c} = 0$  nous l'exprimons également dans l'espace réciproque afin de manipuler une équation algébrique. Si l'équation dans l'espace réciproque était linéaire en  $\hat{c}$  nous pourrions alors la résoudre directement en inversant le système. À l'instar de la résolution du champ  $\delta\mathbf{u}(\mathbf{r})$  dans le cadre de l'équilibre mécanique (voir section 2.1.3.3), ce n'est pas le cas ici. Nous utilisons donc un schéma de point fixe qui nécessite d'identifier une partie linéaire en  $\hat{c}$  afin d'obtenir une solution à l'étape  $n$  qui est utilisée dans l'étape  $n+1$  pour s'approcher par itérations successives de la solution exacte. En toute généralité, nous pouvons identifier dans les forces motrices de  $c$  une partie linéaire en  $c$  (que l'on écrira  $\alpha_1 c$  ou  $\alpha_2 c$ ), une partie non-linéaire qui dépend de  $c$  (fonctions avec un indice impair  $G_1(c)$  ou  $G_3(c)$ ) qui devra être actualisée dans le point fixe, et une partie indépendante de  $c$  (fonction avec un indice pair  $G_2, G_4$  et  $G_6$ ) qui sera calculée à l'entrée du point fixe seulement. Selon les conventions que nous venons de fixer, nous pouvons ré-écrire les équations (2.65) et (2.67) de la façon suivante :

$$\frac{\partial \tilde{f}_{\text{chem}}}{\partial c} = \left( \alpha_1 \tilde{c} + G_1(\tilde{c}) + G_2 \right) \quad (2.82)$$

$$\frac{\partial \tilde{f}_{\text{chem}}}{\partial \eta} = c_0 \left( \alpha_3 \tilde{c} + G_3(\tilde{c}) + G_4 \right) \quad (2.83)$$

Dans ce travail, la démarche qui nous a amenés à un schéma de point fixe qui converge a conduit à définir les grandeurs  $\alpha_i$  et les fonctions  $G_i$  suivantes :

$$g_1 = (D - 1) h(\eta) + 1 \qquad g_3 = (2g_1 - D) h'(\eta)$$

$$\alpha_1 = N\langle g_1 \rangle \qquad \alpha_3 = N\langle g_3 \rangle$$

$$G_1(\tilde{c}) = (g_1 - N\langle g_1 \rangle) \tilde{c} \qquad G_3(\tilde{c}) = \frac{D-1}{2} h'(\eta) \tilde{c}^2 + (g_3 - N\langle g_3 \rangle) \tilde{c}$$

$$G_2 = g_1 (h(\eta) - 1) \qquad G_4 = \frac{h(\eta) - 1}{2} h'(\eta) (3g_1 - D)$$

$$\begin{aligned}
 \hat{G}_6 = & -\mathbf{k}^2 \hat{G}_2(\tilde{t}) \\
 & + \tilde{L}_\phi \tilde{b} \left( \left\{ \frac{\pi^2 \tilde{\Gamma}_d \tilde{C}_{44} \tilde{b}^2}{4 \tilde{w}_d} \sin(2\pi\phi) - \tilde{\sigma}_{ij} \Big|_{l=l_0} (\tilde{b}_i n_j + \tilde{b}_j n_i) h'(\phi) - \tilde{b} G_2 \Big|_{l=l_0} \right\}_{\mathbf{k}, \tilde{t}} \right. \\
 & \left. + \frac{\pi}{2} \tilde{\Gamma}_d \tilde{C}_{44} \tilde{b}^2 \tilde{w}_d (k_m^2 + k_n^2) \hat{\phi}(\tilde{t}) \right) \\
 & + \tilde{L}_\eta \left( \left\{ \frac{24 \tilde{\gamma}_p}{\tilde{w}_p} \eta^2 (2\eta - 3) - \frac{\tilde{C}_{ijkl}}{2} h'(\eta) \tilde{\varepsilon}_{ij}^{\text{el}} \tilde{\varepsilon}_{kl}^{\text{el}} + c_0 G_4 - G_2 \right\}_{\mathbf{k}, \tilde{t}} + \frac{3}{2} \tilde{\gamma}_p \left( \frac{16}{\tilde{w}_p} + \tilde{w}_p \mathbf{k}^2 \right) \hat{\eta}(\tilde{t}) \right)
 \end{aligned}$$

où nous rappelons que  $\langle \square \rangle$  signifie la moyenne spatiale.  $N$  est ici un nombre arbitrairement choisi. En pratique, on observe une bonne convergence pour  $N = D$ . Le schéma de point fixe consiste alors en l'[algorithme 1](#). L'efficacité de cet algorithme en terme de pas de temps maintenant accessible sera discuté plus loin.

---

**Algorithm 1** Résolution du champ de lacunes
 

---

- 1: **Données d'entrée** :  $\phi(\tilde{t}), \eta(\tilde{t})$  et  $c(\tilde{t})$
- 2: **Initialisation** :  $\alpha_1, \alpha_3$
- 3: **Initialisation** :  $\hat{G}_2, \hat{G}_4, \hat{G}_6$
- 4: **Initialisation** :  $\hat{G}_1^0(\tilde{c}(\tilde{t})), \hat{G}_3^0(\tilde{c}(\tilde{t}))$
- 5: **boucle**
- 6:

$$\left\{ \frac{dc^n}{d\tilde{t}} \right\}_{\tilde{k}} = - \left( \mathbf{k}^2 + \tilde{L}_\phi \tilde{b}^2 + \tilde{L}_\eta \right) \hat{G}_1^n(\tilde{c}) - \left( \mathbf{k}^2 + \tilde{L}_\phi \tilde{b}^2 + \tilde{L}_\eta \left( c_0 \frac{\alpha_3}{\alpha_1} - 1 \right) \right) \alpha_1 \tilde{c}^n + \tilde{L}_\eta c_0 \hat{G}_3^n(\tilde{c}) + \hat{G}_6$$

$$7: \quad \frac{dc^n}{d\tilde{t}} \leftarrow \mathcal{F}^{-1} \left( \left\{ \frac{dc^n}{d\tilde{t}} \right\}_{\tilde{k}} \right)$$

$$8: \quad \mathbf{si} \max_{\tilde{v}} \left( \left| \frac{dc^n}{d\tilde{t}} \right| \right) \leq 10^{-3} \mathbf{alors}$$

9:     **SORTIE**

10:    **fin si**

$$11: \quad \tilde{c}_{\tilde{k}}^{n+1} = \frac{\left( \mathbf{k}^2 + \tilde{L}_\phi \tilde{b}^2 + \tilde{L}_\eta \right) \hat{G}_1^n(\tilde{c}) + \tilde{L}_\eta c_0 \hat{G}_3^n(\tilde{c}) + \hat{G}_6}{\left( \mathbf{k}^2 + \tilde{L}_\phi \tilde{b}^2 + \tilde{L}_\eta \left( c_0 \frac{\alpha_3}{\alpha_1} - 1 \right) \right) \alpha_1}$$

$$12: \quad \tilde{c}^{n+1} \leftarrow \mathcal{F}^{-1}(\tilde{c}_{\tilde{k}}^{n+1}), \mathbf{B.C.}$$

$$13: \quad \hat{G}_1^{n+1}(\tilde{c}^{n+1}), \hat{G}_3^{n+1}(\tilde{c}^{n+1})$$

14: **fin boucle**

---

**B.C.** signifie que l'on applique les conditions aux limites souhaitées (concentration fixée en bord de boîte par exemple).

---

## 2.3 Conclusion

Nous avons développé un modèle champ de phase qui permet de simuler les interactions entre des cavités, des montées de dislocations et un champ de lacune. Le bon comportement physique est garanti par une loi de conservation qui lie les champs associés à ces objets. Il s'agit là d'une démarche inédite pour traiter de telles interactions. Nous nous assurons que l'équilibre mécanique est atteint en tout temps. Nous utilisons pour cela un algorithme récent développé au LEM. Nous avons soigné l'implémentation numérique de manière à avoir une efficacité numérique qui nous permette de simuler de longs temps réels en des temps de simulation raisonnables. Nous avons ainsi développé un algorithme de point fixe pour résoudre la diffusion des lacunes dans le cas où celle-ci se fait de manière quasi-statique par rapport à l'évolution des autres champs, ce que nous nous attacherons à vérifier dans chaque situation que nous serons amenée à simuler. Il nous faut désormais vérifier le bon comportement de notre modèle sur des cas simples qui permette ces vérifications, notamment par le biais d'une résolution analytique.

## CHAPITRE

# 3

## ÉTUDE ET VALIDATION DU MODÈLE SUR DES CONFIGURATIONS MODÈLES

### Sommaire

---

<b>3.1 Étude de l'interaction d'un pore avec un champ de lacunes</b> . . . . .	<b>46</b>
3.1.1 Analyse asymptotique . . . . .	47
3.1.2 Commentaires sur l'analyse asymptotique . . . . .	53
3.1.3 Simulations numériques . . . . .	56
3.1.4 Analyse quantitative de l'effet Gibbs-Thomson . . . . .	59
3.1.5 Conclusion . . . . .	64
<b>3.2 Étude de la montée de dislocation</b> . . . . .	<b>64</b>
3.2.1 Analyse asymptotique . . . . .	65
3.2.2 Simulations numériques . . . . .	69
<b>3.3 Conclusion</b> . . . . .	<b>71</b>

---

Dans ce chapitre nous vérifions le bon comportement de notre modèle. Nous comparons pour cela les prédictions de notre modèle à des formules analytiques qu'il nous est possible d'écrire dans deux cas « simples ». Dans la première situation, nous observons la dynamique de fermeture d'un pore de taille nanométrique lorsque nous appliquons une sous-saturation de lacunes aux bords de notre boîte de simulation. Ces observations sont faites à trois dimensions. Nous contrôlons dans un premier temps que le rayon du pore suit bien la dynamique attendue. Nous commentons ensuite quantitativement les effets de sur-saturation en présence d'interfaces courbes – effet Gibbs-Thomson – dont notre modèle rend compte. Nous concluons enfin sur les gains apportés par le traitement spécifique de l'équilibre chimique, dont nous vérifierons les hypothèses d'utilisation. Dans un second temps, nous observons la montée d'un dipôle de dislocations coins, à deux dimensions. Nous vérifions que la vitesse de montée est bien celle attendue, quelle que soit la contrainte ou la sursaturation appliquée au bord du système.

### 3.1 Étude de l'interaction d'un pore avec un champ de lacunes

Nous étudions dans un premier temps le cas de la décroissance d'un pore par diffusion de lacunes telle que décrit sur la [figure 3.1](#). Nous considérons ainsi un pore cylindrique (en 2D) ou sphérique (en 3D) de rayon  $R$ , placé au centre d'un milieu matériel où le champ de concentration en lacunes vaut  $c_\infty < c_0$  sur un cylindre (en 2D) ou une sphère (en 3D) de rayon  $R_\infty$  tels que  $R_\infty > R_0$ , où nous appelons  $R_0$  le rayon initial du pore. Ce cas présente l'intérêt d'avoir une solution analytique stationnaire pour la vitesse de décroissance du pore que nous déterminons à présent à partir de l'analyse du modèle champ de phase dans sa limite dite "asymptotique", *ie* lorsque la largeur des interface tend vers 0.

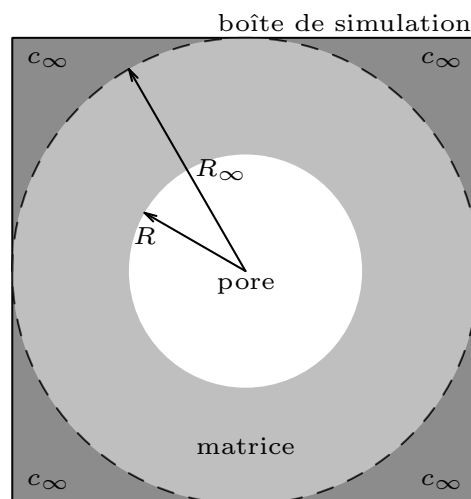


FIGURE 3.1 – Fermeture d'un pore par sous-saturation de lacunes : schéma de la situation initiale. Nous appelons  $R_0$  le rayon initial du pore. Une concentration  $c_\infty < c_0$  est imposée sur une sphère de rayon  $R_\infty > R_0$ .

### 3.1.1 Analyse asymptotique

Nous utilisons une approche continue. Nous introduisons un repère polaire ou sphérique dans un espace à 2 ou 3 dimensions respectivement. Au regard des symétries observées [figure 3.1](#), nous considérons les champs  $\eta(\mathbf{r}) = \eta(r) \frac{\mathbf{r}}{\|\mathbf{r}\|}$  et  $c(\mathbf{r}) = c(r) \frac{\mathbf{r}}{\|\mathbf{r}\|}$ , caractéristiques du pore et du champ de lacunes respectivement. Nous considérons comme nulle la contribution à l'énergie élastique du champ de lacunes. Nous reprenons les [équations \(2.39\) et \(2.52\)](#) introduites dans le chapitre précédent et qui caractérisent l'évolution couplée des champs  $\eta$  et  $c$  respectivement. Dans ces équations, nous remplaçons  $h(\eta)$  par  $\eta$ . La généralisation à  $h(\eta)$  quelconque dans le respect des conditions fixées [section 2.1.2](#) est évidente dans la mesure où  $\int_0^1 h'(\eta) = 1$ . L'[équation \(2.39\)](#), développée selon les hypothèses sus-citées, donne la loi d'évolution du champ  $\eta$  en présence d'un champ de lacunes :

$$\dot{\eta}(r) = -L_\eta \left( \frac{\partial f_{\text{tot}}}{\partial \eta} - \frac{\partial f_{\text{tot}}}{\partial c} - \frac{3}{2} \gamma_p w_p \left( \frac{\partial^2 \eta}{\partial r^2} + \frac{d-1}{r} \frac{\partial \eta}{\partial r} \right) \right), \quad (3.1)$$

où  $d$  est la dimension de l'espace. Les dérivées partielles sont explicitées au chapitre précédent dans les [équations \(2.40\) à \(2.46\)](#). Nous les ré-arrangeons de la manière suivante :

$$\frac{\partial f_{\text{tot}}}{\partial \eta} = g'(\eta) - f_{\text{el}} + \mu(c, \eta) c^*(c, \eta), \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial f_{\text{tot}}}{\partial c} = \mu(c, \eta) = \frac{k_B T}{\Omega c_0} \left( (D-1)\eta + 1 \right) \left( c - c_0(1-\eta) \right), \quad (3.3)$$

où nous avons défini les quantités suivantes :

$$g'(\eta) = \frac{24\gamma_v}{w_v} (\eta - 3\eta^2 + 2\eta^3), \quad (3.4)$$

$$f_{\text{el}} = \frac{1}{2} C_{ijkl} \epsilon_{ij}^{\text{el}} \epsilon_{kl}^{\text{el}}, \quad (3.5)$$

$$c^*(c, \eta) = \frac{(D-1)c - c_0(1-\eta)}{2(D-1)\eta + 1} + c_0. \quad (3.6)$$

Nous écrivons donc la relation suivante :

$$\dot{\eta}(r) = -L_\eta \left( g'(\eta) - f_{\text{el}} - \frac{3}{2} \gamma_p w_p \left( \frac{\partial^2 \eta}{\partial r^2} + \frac{d-1}{r} \frac{\partial \eta}{\partial r} \right) + \mu(c, \eta) \left( c^*(c, \eta) - 1 \right) \right). \quad (3.7)$$

#### 3.1.1.1 Profil d'équilibre pour un pore statique

Considérons dans un premier temps le cas d'un pore statique, soit  $\dot{\eta} = 0$ . Sous certaines hypothèses, il est possible de déterminer le profil analytique du champ  $\eta$ . Nous considérons ainsi les hypothèses suivantes :

- La contribution  $f_{\text{el}}$  est considérée comme négligeable vis à vis des autres contributions pour l'établissement du profil, ce qui devra être vérifié a posteriori.
- La matrice est à l'équilibre chimique, soit ici  $\mu = 0$ . En particulier, il n'y a pas de sous ou sur-saturation. En tout point de l'espace, la relation suivante lie ainsi les champs  $c$  et  $\eta$  (voir [équation \(3.6\)](#)) :

$$\eta + \frac{c}{c_0} = 1. \quad (3.8)$$

- Le rayon de courbure du pore est considéré comme très grand devant les autres longueurs caractéristiques du problème. De cette façon, nous pouvons négliger l'effet de la courbure du pore, qui tend à le fermer, même en l'absence de force motrice. La contribution du laplacien en  $1/r$  tend ainsi vers 0.

En appliquant l'ensemble de ces hypothèses à l'équation (3.7), nous obtenons l'équation suivante :

$$g'(\eta) - \frac{3}{2}\gamma_v w_v \frac{\partial^2 \eta}{\partial r^2} = 0. \quad (3.9)$$

L'interface est centrée en  $r = R$  et nous imposons  $\eta(r = 0) \rightarrow 1$  et  $\eta(r \rightarrow +\infty) = 0$ . Nous rappelons que  $0 \ll R \ll +\infty$ . Le raisonnement complet et détaillé concernant la résolution de l'équation (3.9) est donné Annexe A. Le profil d'équilibre  $\eta_0$  est le suivant :

$$\eta_0(r) = \frac{1}{2} \left( \tanh \left( \frac{2(R-r)}{w_p} \right) + 1 \right). \quad (3.10)$$

Ce profil est représenté figure 3.3. Conformément à la construction du modèle (voir chapitre 1),  $w_p$  définit bien une largeur d'interface. Ce profil possède par ailleurs une énergie qui n'est autre que  $\gamma_p$  (voir Annexe A).

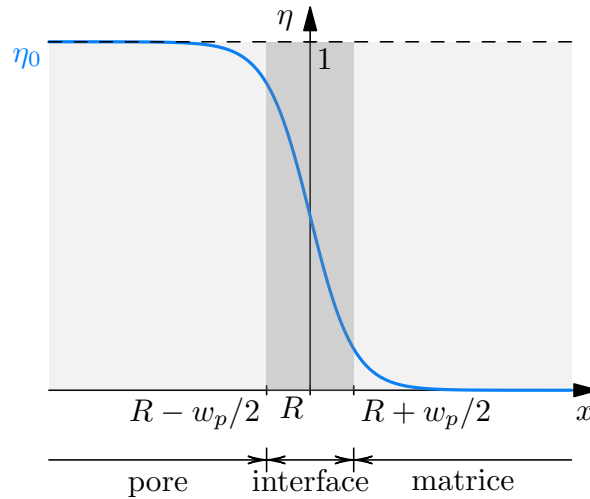


FIGURE 3.2 – Profil stationnaire  $\eta_0$  (voir équation (3.10)).

### 3.1.1.2 Calcul de la vitesse de l'interface

Pour traiter le cas où l'interface du pore peut se mouvoir, nous faisons l'hypothèse que le profil de celle-ci ne s'éloigne pas trop du profil d'équilibre  $\eta_0$ . Nous considérons en particulier que le champ  $\eta(r, t)$  vérifie également l'équation (3.9). Nous pouvons donc ré-écrire l'équation (3.7) de la manière suivante :

$$\dot{\eta}(r) = -L_\eta \left( -f_{el} - \frac{3}{2}\gamma_p w_p \frac{d-1}{r} \frac{\partial \eta}{\partial r} + \mu(c, \eta) (c^*(c, \eta) - 1) \right). \quad (3.11)$$

Nous considérons que le mouvement de la surface du pore s'effectue à une vitesse  $v = \partial R / \partial t$  et correspond à un mouvement du profil d'équilibre suivant la forme  $\eta(r, t) = \eta_0(r - vt)$ . Nous pouvons

ainsi écrire l'équation suivante :

$$-v \frac{\partial \eta}{\partial r} = -L_\eta \left( -f_{\text{el}} - \frac{3}{2} \gamma_p w_p \frac{d-1}{r} \frac{\partial \eta}{\partial r} + \mu(c, \eta) (c^*(c, \eta) - 1) \right). \quad (3.12)$$

Nous multiplions cette équation par  $\partial \eta / \partial r$  puis nous intégrons selon  $r$ , dans la direction perpendiculaire à l'interface. Nous obtenons la relation suivante :

$$\begin{aligned} \frac{v}{L_\eta} \int_0^\infty \left( \frac{\partial \eta}{\partial r} \right)^2 dr &= \int_0^\infty -f_{\text{el}} \frac{\partial \eta}{\partial r} dr - \frac{3}{2} \gamma_p w_p \int_0^\infty \frac{d-1}{r} \left( \frac{\partial \eta}{\partial r} \right)^2 dr \\ &\quad + \int_0^\infty \mu(c, \eta) (c^*(c, \eta) - 1) \frac{\partial \eta}{\partial r} dr. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Le gradient  $\partial \eta / \partial r$  est important dans l'interface et négligeable partout ailleurs. Avant d'aller plus loin, nous devons préciser la forme de la densité d'énergie élastique  $f_{\text{el}}$  et du produit  $\mu(c, \eta) (c^*(c, \eta) - 1)$  qui apparaissent, respectivement, dans la première et la dernière intégrale de l'équation (3.13).

### Calcul de la force motrice élastique

Pour évaluer la contribution élastique, nous considérons la situation expérimentale où le système est placé sous pressage isostatique à chaud (HIP). Nous considérons ainsi une cavité cylindrique ou sphérique, à 2 ou 3 dimensions respectivement, de rayon  $R$  et à l'intérieur de laquelle règne une pression nulle, placée dans un milieu de rayon  $R_\infty$  sous contrainte appliquée  $\sigma^A = -p\mathbb{1}$ , avec  $p > 0$ . Le milieu environnant la cavité est considéré comme isotrope et est caractérisé par un module d'Young  $E$  et de coefficient de Poisson  $\nu$ . À 2 dimensions, on montre que (voir par exemple Landau *et al.* [1986]) :

$$r < R \quad : \quad f_{\text{el}}(r) = 0 \quad (3.14)$$

$$r \geq R \quad : \quad f_{\text{el}}(r) = \frac{p^2 R_\infty^4}{(r^2 - R_\infty^2)^2} \left( \frac{2(1 - \nu^2)}{E} \right). \quad (3.15)$$

À 3 dimensions, la force motrice élastique prend la valeur suivante :

$$r < R \quad : \quad f_{\text{el}}(r) = 0 \quad (3.16)$$

$$r \geq R \quad : \quad f_{\text{el}}(r) = \frac{p^2 R_\infty^6}{(r^3 - R_\infty^3)^2} \left( \frac{9(1 - \nu)}{4E} \right). \quad (3.17)$$

Nous pouvons maintenant estimer la première intégrale des membres de droite de l'équation (3.13). La densité d'énergie élastique  $f_{\text{el}}(r)$  est nulle pour  $r < R$  et, pour  $r \geq R$ , varie lentement à l'échelle de la largeur de la fonction  $\partial \eta / \partial r$ . Cette première intégrale peut donc être approximée par  $\frac{1}{2} f_{\text{el}}(R)$ . Dans la limite  $R_\infty \gg R$ , son expression est estimée par :

$$\int_0^\infty -f_{\text{el}} \frac{\partial \eta}{\partial r} dr \sim \alpha \frac{p^2}{E}, \quad (3.18)$$

où  $\alpha$  est typiquement de l'ordre de l'unité.



### Calcul de la force motrice d'origine chimique

Nous voulons maintenant étudier le comportement du produit  $\mu(c, \eta) \left( c^*(c, \eta) - 1 \right)$  qui intervient dans la dernière intégrale du terme de droite de l'équation (3.13). Nous adoptons comme convention les signes « + » et « - » pour les quantités exprimées au voisinage immédiat de l'interface, dans la matrice et dans le pore respectivement. En  $r = R^-$ , le champ  $\eta$  vaut 1. Le potentiel chimique donné par l'équation (3.3) devient :

$$\mu(R^-) = \frac{k_B T}{\Omega c_0} D c(R^-). \quad (3.19)$$

En  $r = R^+$ , le champ  $\eta$  vaut 0. Le potentiel chimique devient :

$$\mu(R^+) = \frac{k_B T}{\Omega c_0} \left( c(R^+) - c_0 \right). \quad (3.20)$$

Le potentiel chimique est continu au travers de l'interface, soit  $\mu(R^-) = \mu(R^+)$ , ce qui entraîne la relation suivante :

$$c(R^-) = \frac{1}{D} \left( c(R^+) - c_0 \right). \quad (3.21)$$

Nous avons ainsi une relation entre la concentration en lacunes à l'intérieur du pore, et celle aux abords immédiats de la surface du pore, dans la matrice, qui ne fait intervenir que le paramètre  $D$  du modèle champ de phase. Nous constatons ainsi que  $D$  fixe le rapport des écarts à l'équilibre des concentrations en lacunes dans chaque phase, au niveau de l'interface. Or nous avons choisi de caractériser la présence d'un pore par un champ additionnel non conservé  $\eta$  et non en le considérant comme un agrégat de lacunes. Les champs  $\eta$  et  $c$  interagissent *via* la cinétique, au travers d'une loi de conservation. Des lacunes se « transforment » ainsi en pore au cours du temps et *vice versa*. Par conséquent, nous devons avoir  $c(R^-) \rightarrow 0$ , qui traduit l'idée physique selon laquelle il n'est pas attendu que des lacunes s'accumulent dans la cavité, quel que soit son rayon. Pour que cette condition soit vérifiée quelque soit  $c(R^+)$ , nous devons donc, d'après l'équation (3.21), avoir  $D \gg 1$ . Pour la suite, nous posons  $c^+ = c(R^+)$  et  $c^- = c(R^-)$  et nous écrivons le potentiel chimique en  $R$  :

$$\mu(R) = \frac{k_B T}{\Omega c_0} \left( c^+ - c_0 \right). \quad (3.22)$$

Nous rappelons la définition de  $c^*$  donnée équation (3.6). Aux abords de l'interface du pore, nous avons les équations suivantes :

$$c^*(R^+) - c_0 = \frac{D-1}{2} \left( c^+ - c_0 \right), \quad (3.23)$$

$$c^*(R^-) - c_0 = \frac{D-1}{2D^2} \left( c^+ - c_0 \right), \quad (3.24)$$

où nous avons utilisé l'équation (3.21) dans la dernière équation. Nous devons maintenant estimer  $c^+$ , la concentration en lacunes au pied de l'interface, du côté de la matrice. Nous verrons plus loin (voir section 3.1.2.3) que, dans les conditions de travail considérées ici (hypothèse de l'équilibre local au niveau de l'interface et pression extérieure  $p$  suffisamment faible), la concentration  $c^+$  au pied de l'interface est essentiellement contrôlée par l'effet Gibbs-Thomson. Plus précisément, nous établirons

que l'écart entre  $c^+$  et la concentration d'équilibre dans la matrice  $c_0$  est donnée approximativement par :

$$c^+ - c_0 \simeq \frac{d_0}{R}(d-1)(1-c_0), \quad (3.25)$$

où  $d$  est la dimension de l'espace et où  $d_0$  est la longueur capillaire qui, ici, est donnée par :

$$d_0 = \frac{\gamma_p \Omega c_0}{k_B T (1-c_0)^2} \quad (3.26)$$

En reportant l'équation (3.25) dans les équations (3.23) et (3.24), nous constatons immédiatement que la variation de la quantité  $c^*(r)$  dans l'interface est négligeable si nous avons l'inégalité suivante :

$$D \ll \frac{R}{d_0} \quad (3.27)$$

Cette condition n'est en pratique pas trop restrictive au regard des conditions (température, matériaux) dans lesquelles nous travaillons (voir Annexe B). Dans les simulations que nous effectuons par la suite, nous constatons que  $D = 10$  est suffisant pour respecter la condition que nous venons d'énoncer tout en assurant une bonne intégration numérique. Hormis dans les cas où nous le spécifions, c'est cette valeur qui est prise dans nos simulations. Nous serons donc toujours dans des situations où la quantité  $c^*(r)$  varie peu dans l'interface et peut être estimée par :

$$c^*(R) \approx c^*(R^+) \approx c^*(R^-) \approx c_0. \quad (3.28)$$

Nous rappelons par ailleurs que le potentiel chimique est continu à l'interface. Nous pouvons donc finalement considérer que le produit  $\mu(c, \eta) (c^*(c, \eta) - 1)$ , qui intervient dans la dernière intégrale du membre de droite de l'équation (3.13), varie peu à l'échelle de la largeur de la fonction  $\partial\eta/\partial r$ . Cette intégrale peut donc être estimée de la manière suivante :

$$\int_0^\infty \mu(c, \eta) (c^*(c, \eta) - 1) \frac{\partial\eta}{\partial r} dr \sim \mu(R) (c^*(R) - 1) \int_0^\infty \frac{\partial\eta}{\partial r} dr \quad (3.29)$$

$$\sim -\frac{k_B T}{\Omega c_0} (c^+ - c_0) (c_0 - 1). \quad (3.30)$$

### Calcul de la vitesse de fermeture du pore

Nous rassemblons les conclusions des calculs que nous venons de mener dans les paragraphes précédents. L'équation (3.13) devient l'équation suivante :

$$\frac{v}{L_\eta} \int_0^\infty \left( \frac{\partial\eta}{\partial r} \right)^2 dr = \alpha \frac{p^2}{E} - \frac{3}{2} \gamma_p w_p \int_0^\infty \frac{d-1}{r} \left( \frac{\partial\eta}{\partial r} \right)^2 dr - \frac{k_B T}{\Omega c_0} (c^+ - c_0) (c_0 - 1), \quad (3.31)$$

La quantité  $\frac{d-1}{r}$  varie peu à l'échelle de la largeur de la fonction  $\partial\eta/\partial r$ . Cette intégrale peut donc être estimée de la manière suivante :

$$\int_0^\infty \frac{d-1}{r} \left( \frac{\partial\eta}{\partial r} \right)^2 dr = \frac{d-1}{R} \int_0^\infty \left( \frac{\partial\eta}{\partial r} \right)^2 dr \quad (3.32)$$

Par construction du modèle (voir Annexe A), nous obtenons facilement la valeur de l'intégrale  $\int_0^\infty \left( \frac{\partial\eta}{\partial r} \right)^2 dr$ .

Nous pouvons donc écrire la relation finale suivante, valable en dimension  $d$  :

$$\frac{2}{3w_p L_\eta} v = \alpha \frac{p^2}{E} - \frac{(d-1)}{R} \gamma_p - \frac{k_B T}{\Omega c_0} (c^+ - c_0) (c_0 - 1). \quad (3.33)$$

Nous avons donc une première expression de la vitesse d'évolution du rayon du pore issue de l'équation cinétique suivie par le champ de phase qui le représente, c'est à dire l'équation (2.49), qui, ici, a pris la forme de l'équation (3.1). Il existe évidemment une seconde expression due au fait que le pore ne peut évoluer qu'en échangeant des lacunes avec la matrice. C'est cette seconde expression que nous allons établir maintenant. Nous appliquons pour cela la seconde loi de Fick dans la matrice. L'évolution du champ de lacunes est considérée comme quasi statique par rapport au mouvement de l'interface du pore et nous pouvons donc considérer que  $\dot{c} = 0$ . Nous nous sommes ainsi ramenés au problème de Dirichlet suivant :

$$\begin{cases} \nabla^2 c(r) = 0, \\ c(R) = c^+, \\ c(R_\infty) = c_\infty. \end{cases} \quad (3.34)$$

À deux dimensions ( $d = 2$ ), le champ de concentration en lacunes solution s'écrit de la manière suivante :

$$c(r) = c_\infty + (c_\infty - c^+) \frac{\ln(r/R_\infty)}{\ln(R_\infty/R)}. \quad (3.35)$$

À trois dimensions ( $d = 3$ ), la solution est la suivante :

$$c(r) = c_\infty + (c_\infty - c^+) \frac{R}{R_\infty - R} \left( 1 - \frac{R_\infty}{r} \right). \quad (3.36)$$

Dans le cas tri-dimensionnel, le flux de lacunes arrivant à la surface du pore est  $\mathbf{j} = -D_v [\partial c / \partial r]_{r=R}$  et le volume du pore  $V = (4/3)\pi R^3$  décroît à la vitesse  $dV/dt = -j 4\pi R^2$ . En réalisant le même raisonnement dans le cas 2D, nous en arrivons aux expressions de vitesses suivantes, suivant la dimension de l'espace :

$$d = 2, \quad v = D_v \frac{c_\infty - c^+}{R \ln(R_\infty/R)}, \quad (3.37)$$

$$d = 3, \quad v = D_v \frac{c_\infty - c^+}{R_\infty - R} \frac{R_\infty}{R}. \quad (3.38)$$

En remarquant que l'équation (3.33) et, selon la dimension, l'équation (3.37) ou l'équation (3.38) sont les expressions de la même vitesse  $v$ , nous déterminons  $c^+$  et nous obtenons finalement :

$$d = 2, \quad v = \frac{D_v (c_0 - 1) (c_0 - c_\infty) + M\alpha \frac{p^2}{E} - M \frac{\gamma_p}{R}}{-(c_0 - 1) R \ln\left(\frac{R_\infty}{R}\right) + \frac{2M}{3w_p L_\eta}}, \quad (3.39)$$

$$d = 3, \quad v = \frac{D_v (c_0 - 1) (c_0 - c_\infty) + M\alpha \frac{p^2}{E} - M \frac{2\gamma_p}{R}}{(c_0 - 1) \frac{R(R - R_\infty)}{R_\infty} + \frac{2M}{3w_p L_\eta}}. \quad (3.40)$$

où  $M$  est la mobilité des lacunes définie équation (2.51).

### 3.1.2 Commentaires sur l'analyse asymptotique

Nous avons déterminé une formule analytique de la vitesse fermeture d'un pore dans le cadre décrit par la [figure 3.1](#), à deux et trois dimensions. Cette vitesse correspond à la limite de notre modèle lorsque l'épaisseur de la surface du pore devient infiniment étroite et que le champ de concentration en lacunes est stationnaire (c'est-à-dire qu'il évolue de façon quasi-statique par rapport au champ  $\eta$  caractéristique de la présence du pore). Les [équations \(3.39\) et \(3.40\)](#) nous donnent une base de comparaison avec d'autres approches analytiques que nous avons pu identifier dans la littérature [[Epishin et al., 2018](#); [Rovelli et al., 2017](#)]. Elles nous permettent également de disposer, à 2D et à 3D, d'une vitesse asymptotique vers laquelle nos simulations, dans le respect du cadre défini, indépendamment des considérations relevant de l'intégration numérique, doivent tendre. Dans la partie qui suit, nous utilisons ce résultat comme une référence vers laquelle le modèle doit tendre lorsque  $\dot{c} = 0$ , ce qui sera aussi notre hypothèse de travail. Nous faisons ainsi le choix d'une mobilité  $L_\eta$  en lien avec les processus physiques que nous considérons. Dans le même temps, la comparaison entre la vitesse de fermeture analytique et celle obtenue dans les simulations permettra de choisir des valeurs optimales pour d'autres paramètres numériques ( $\Delta t$ , critère d'arrêt du point fixe pour l'évolution du champ de lacunes) qui sont choisis pour garantir un compromis satisfaisant entre la précision des résultats et les performances de calculs.

#### 3.1.2.1 Équilibre local

Nous supposons que les échanges en lacunes entre la matrice et le pore au travers de l'interface sont instantanés. Nous supposons en particulier qu'ils ne sont pas contrôlés par des processus ayant lieu à l'interface matrice/pore. Il s'agit de l'hypothèse d'« équilibre local ». Le paramètre champ de phase qui contrôle les échanges que nous venons de décrire est la mobilité  $L_\eta$  (voir [équation \(2.39\)](#)). Dans le cas de la montée de dislocations, [Geslin et al. \[2015\]](#) lie ce paramètre à la densité de crans le long de la ligne de dislocation. L'hypothèse d'équilibre local est vérifiée lorsque les échanges se font instantanément, soit  $L_\eta \rightarrow +\infty$ . Numériquement, il s'agit de fixer  $L_\eta$  assez grand pour observer une cinétique de fermeture proche de celle attendue pour  $L_\eta \rightarrow +\infty$ , à moindre coûts de calculs. Nous nous plaçons dans un cadre tri-dimensionnel. En rappelant la définition de la mobilité adimensionnée  $\tilde{L}_\eta$  donnée [tableau 2.1](#), nous pouvons écrire l'expression de la vitesse de fermeture du pore :

$$v_{3D} = \frac{D_v (c_0 - 1) (c_0 - c_\infty) + M\alpha \frac{p^2}{E} - M \frac{2\gamma_p}{R}}{\underbrace{(c_0 - 1) \frac{R(R - R_\infty)}{R_\infty}}_1 + \underbrace{\frac{2d}{3\tilde{w}_p \tilde{L}_\eta}}_2}, \quad (3.41)$$

où nous rappelons que  $d$  est le pas de grille introduit lors de la discrétisation. Nous identifions sur cette équation 2 termes, dont l'un fait intervenir  $\tilde{L}_\eta$ . L'hypothèse d'équilibre local se traduit par le caractère négligeable de ce deuxième terme devant le premier, de sorte qu'il n'influence plus la cinétique de fermeture. En gardant à l'esprit que  $c_0 \ll 1$  et  $R_\infty \gg R$ ,  $\tilde{L}_\eta$  doit ainsi satisfaire à la relation suivante :

$$\tilde{L}_\eta \gg \frac{2}{3\tilde{w}_p \tilde{R}}. \quad (3.42)$$

Pour des convenances numériques,  $\tilde{w}_p = 4$  est un minimum [[Finel et al., 2018](#)]. Dans le cas le plus restrictif où  $\tilde{R} = 1$  (cas extrême où nous ne sommes plus capables de distinguer l'objet de son interface),

la condition d'équilibre local est la suivante :

$$\tilde{L}_\eta \gg 0.17. \quad (3.43)$$

Nous pouvons conduire le même type de raisonnement dans le cas 2D qui se révèle alors moins restrictif que le cas 3D que nous venons d'étudier. En pratique, nous réalisons ainsi nos simulations avec

$$\tilde{L}_\eta = 1 \quad (3.44)$$

et nous adaptons les paramètres numériques restants ( $\Delta t$  et le critère d'arrêt du point fixe pour l'évolution du champ de lacunes) de manière à nous approcher du cas  $L_\eta \rightarrow +\infty$  selon une certaine précision, pour un coût de calcul le plus faible possible.

### 3.1.2.2 Régimes cinétiques limites

Sous l'hypothèse de l'équilibre local et en considérant de plus  $R_\infty \gg R$  et  $c_0 \ll 1$ , l'équation (3.40) se ré-écrit de la sorte :

$$R \frac{dR}{dt} = \underbrace{D_v(c_\infty - c_0)}_1 + \underbrace{M\alpha \frac{p^2}{E}}_2 - \underbrace{M \frac{2\gamma_p}{R}}_3. \quad (3.45)$$

Cette équation nous permet d'identifier trois régimes cinétiques, associés à la prédominance des termes 1,2 et 3 sur les deux autres. Dans les applications pratiques,  $p$  est de l'ordre de la centaine (du millier tout au plus) de MPa tandis que  $E$  est de l'ordre de la centaine de GPa pour les métaux. Nous rappelons que  $\alpha$  est de l'ordre de l'unité. Nous pouvons ainsi montrer que la contribution 2 est toujours négligeable devant les deux autres, quel que soit le rayon du pore<sup>1</sup>. Nous nous intéressons maintenant aux domaines de prédominance des deux autres termes, 1 et 3.

Nous regardons tout d'abord le rayon du pore pour lequel les termes cités ont une influence égale sur la cinétique de son interface. Cette égalité des contributions définit le rayon critique  $R_c$  suivant :

$$R_c = \frac{\Omega c_0}{k_B T} \frac{2\gamma_p}{|c_0 - c_\infty|}. \quad (3.46)$$

Dans le cas d'une sous-saturation ( $c_\infty < c_0$ ), les contributions 1 et 3 agissent conjointement. Il y a cependant un changement de régime temporel au voisinage  $R \sim R_c$ . Dans le cas d'une sur-saturation ( $c_\infty > c_0$ ),  $R_c$  définit un rayon pour lequel le pore ne bouge pas, mais est instable. Nous retrouvons d'ailleurs ici les conclusions de [Rovelli et al. \[2017\]](#), qui approche de manière originale l'interaction de pores, de lacunes et de dislocations à haute température dans le tungstène au moyen de fonctions de Green. Dans cet article, le pore ne grossit ni ne se ferme pour une valeur  $R_c$  de son rayon vérifiant (à 3D) :

$$c(R_c) - c_\infty = 0, \quad (3.47)$$

1. Dans le CMSX-4 sous HIP (voir [Annexe B](#)), l'ordre de grandeur de la contribution 1 est  $10^{-15} \text{ m}^2.\text{s}^{-1}$ , celui de la contribution 3 est  $10^{-23}/R \text{ m}^2.\text{s}^{-1}$ , où  $R$  est exprimé en mètres. La contribution 2, avec  $p \sim 100 \text{ MPa}$ , est de l'ordre de  $10^{-17} \text{ m}^2.\text{s}^{-1}$ .

avec

$$c(R_c) = c_0 \exp\left(\frac{2\gamma_p\Omega}{k_B T R_c}\right) \quad (3.48)$$

la concentration proche de l'interface, fixée par l'effet Gibbs-Thomson, ce qui donne  $R_c = \frac{2\gamma_p\Omega}{k_B T \ln(c_\infty/c_0)}$ . En linéarisant le logarithme, on retrouve l'équation (3.46). Cette expression est valide si  $c_\infty - c_0 \ll c_0$ . Suivant son rayon, le pore peut alors croître ou se fermer, suivant que la relaxation marginale d'énergie est liée à la redistribution des espèces par diffusion ou à la diminution de l'énergie de surface.

Examinons plus en détails le régime de sous-saturation ( $c_\infty < c_0$ ). Lorsque  $R \ll R_c$ , le terme 3 prévaut sur le terme 1. La dissipation de l'énergie liée à la surface du pore devient prépondérante par rapport à la relaxation par diffusion. La décroissance du pore est alors donnée par :

$$R^3(t) = R_0^3 - 6M\gamma_p t \quad (3.49)$$

Lorsque  $R \gg R_c$ , le terme 1 prime sur le terme 3. La relaxation d'énergie par diffusion domine par rapport à la dissipation de l'énergie de surface. La décroissance du pore suit alors la loi suivante :

$$R^2(t) = R_0^2 - 2D_v (c_0 - c_\infty) t \quad (3.50)$$

Ce dernier cas correspond notamment au régime de fermeture des pores étudiés par [Epishin et al. \[2018\]](#) dans le superalliage CMSX-4 sous HIP, dont les rayons caractéristiques sont de l'ordre de  $R \sim 10^{-6}$  m. Dans cette étude en effet, il est fait l'hypothèse que le pore se trouve au centre d'un domaine dont les limites sont des joints de grain de faible désorientation (LABs pour Low Angle Boundaries en anglais) qui sont par ailleurs décrits comme des murs de dislocations empilées les unes sur les autres (modèle de Read et Shockley [[Read et Shockley, 1950](#)]). Dans ce cas, il est possible d'évaluer la concentration des lacunes au niveau des joints (ici  $c_\infty$ ) en considérant l'équilibre des forces motrices d'origine chimique et élastique (le matériau étant sous pression  $p > 0$ ). Nous obtenons ainsi la relation suivante :

$$c_\infty = c_0 \left(1 - \frac{p\Omega}{k_B T} \left(1 + \frac{V^*}{\Omega}\right)\right) \quad (3.51)$$

où nous rappelons que  $V^*/\Omega = \text{Tr}(\xi^{0,v})$  représente la dilatation induite par la présence d'une lacune. Pour une lacune,  $V^* < 0$  traduit le fait qu'il s'agit en fait d'une contraction induite. Les équations (3.46) et (3.51) aboutissent à un rayon critique  $R_c$  donné par :

$$R_c = \frac{2\gamma_p}{p \left(1 + \frac{V^*}{\Omega}\right)} \quad (3.52)$$

En utilisant les données de l'Annexe B, nous évaluons  $R_c \sim 10^{-8}$  m qui est bien inférieur aux rayons micrométriques des pores étudiés. Dans [Epishin et al. \[2018\]](#), les auteurs retrouvent ainsi l'équation (3.50) qui correspond donc à un cas particulier de notre analyse asymptotique.

### 3.1.2.3 Concentration de lacunes au pied de l'interface

Nous revenons ici sur une hypothèse que nous avons faite plus haut lorsque nous voulions estimer la vitesse de l'interface du pore (voir section 3.1.1.2, équation (3.25)). Nous avons alors indiqué que la concentration  $c^+$  au pied de l'interface côté matrice était donné par l'effet Gibbs-Thomson

(voir [équation \(3.25\)](#) et discussion préalable). Nous allons maintenant justifier cette hypothèse. Nous avons indiqué plus haut (voir [section 3.1.2.1](#)) que nous nous mettions dans l'hypothèse de l'équilibre local au niveau de l'interface, ce qui implique que le coefficient de mobilité  $L_\eta$  est suffisamment grand pour que le champ de phase  $\eta(\mathbf{r}, t)$ , qui représente le pore, adopte un profil quasi statique vis à vis de l'évolution de son rayon. En d'autres termes, le rapport  $v/L_\eta$  qui apparaît dans le terme de gauche de [l'équation \(3.33\)](#) est essentiellement nul. En ajoutant à cela que la force motrice  $\alpha p^2/E$  est négligeable vis à vis des autres forces motrices (voir discussion dans la [section 3.1.2.2](#)), nous obtenons immédiatement l'estimation suivante pour l'écart entre la concentration  $c^+$  et la concentration d'équilibre dans la matrice  $c_0$  :

$$c^+ - c_0 \approx \frac{d_0}{R}(d-1)(1-c_0), \quad (3.53)$$

où la longueur capillaire  $d_0$  a été définie [équation \(3.26\)](#). Cette expression est précisément celle que nous avons anticipée dans [l'équation \(3.25\)](#).

### 3.1.3 Simulations numériques

La démarche que nous avons menée dans les [sections 3.1.1](#) et [3.1.2](#) nous a permis d'encadrer quantitativement les paramètres physiques  $D$  et  $L_\eta$ , selon les hypothèses dans lesquelles nous souhaitons travailler (pas de lacune dans le pore et équilibre local). Nous souhaitons désormais fixer les paramètres relevant de l'intégration numérique, soit le pas de temps  $\Delta\tilde{t}$  et le critère de convergence du point fixe pour l'équilibre chimique. Nous entendons par critère de convergence la borne supérieure au cours des itérations successives du point fixe pour  $\|dc/d\tilde{t}\|_\infty$ . Par abus de langage, nous appelons  $\|dc/d\tilde{t}\|_\infty$  ou  $\max_V |dc/d\tilde{t}|$  ce critère. [L'équation \(2.81\)](#) et [l'algorithme 1](#) montrent que les paramètres physiques  $D$  et  $\tilde{L}_\eta$  et les paramètres numériques  $\Delta\tilde{t}$  et  $\|dc/d\tilde{t}\|_\infty$  interviennent ensemble dans le schéma numérique. Le choix de l'un de ces paramètres ne peut donc être dissocié du choix des trois autres. Nous fixons  $\tilde{L}_\eta = 1$  (voir [section 3.1.2](#)) et nous déterminons les paramètres  $\{D, \Delta\tilde{t}, \|dc/d\tilde{t}\|_\infty\}$  de manière à obtenir un compromis satisfaisant entre précision et performance. Nous quantifions la précision de la manière suivante. À 3 dimensions et dans le cadre de la fermeture d'un pore par sous-saturation et dont le rayon initial est  $R_0 = 3.16$  nm, nous traçons le rapport  $R(t)^2/R_0^2$ . Nous mesurons la pente de la droite ainsi obtenue. Nous nous imposons un écart maximal de 5% entre cette pente et la pente associée à [l'équation \(3.40\)](#) obtenue lors de l'analyse asymptotique, prise comme référence dans les conditions où celle-ci est recevable, c'est à dire dans les conditions où le rayon du pore reste suffisamment grand par rapport à l'épaisseur de l'interface. De tous les jeux de paramètres  $\{D, \Delta\tilde{t}, \|dc/d\tilde{t}\|_\infty\}$  qui permettent de satisfaire à cette condition de précision, nous retenons le jeu le plus économe en temps de calcul. La totalité de la démarche est donnée plus en détails dans [l'Annexe C](#). Nous donnons [tableau 3.1](#) le choix final du jeu de paramètres  $\{D, \Delta\tilde{t}, \|dc/d\tilde{t}\|_\infty\}$ . Nous pouvons remarquer que le choix numérique de  $D$  est proche du choix des paramètres jouant un rôle similaire dans [Rokkam et al. \[2009\]](#).

Nous simulons la fermeture 3D d'un pore de taille nanométrique dans du CMSX-4 à 1561K selon les dispositions présentées [figure 3.1](#) et [tableau 3.1](#). Les paramètres matériaux sont donnés [Annexe B](#). Les paramètres de simulation – conditions initiales, pas de grille, conditions aux bords – sont donnés [tableau 3.2](#). Les contributions élastiques ne sont pas prises en compte (pas de pression appliquée, vo-

$D$	$\Delta\tilde{t}$	$\ dc/d\tilde{t}\ _\infty$
10	$10^{-3}$	$10^{-3}$

 TABLEAU 3.1 – Choix du jeu de paramètres  $\{D, \Delta\tilde{t}, \|dc/d\tilde{t}\|_\infty\}$  pour la fermeture d'un pore.

lume de dilatation nul pour les lacunes). Nous regardons d'une part la cinétique de fermeture du pore et observons d'autre part les profils des champs  $c/c_0$  et  $\eta$ .

pas de grille $d$	1 nm
largeur d'interface $w_p$	4nm
Concentration à l'infini $c_\infty$	$1.33 \cdot 10^{-6}$ ( $0.8 c_0$ )
Rayon initial du pore $R_0$	16 nm
Rayon limite $R_\infty$	32 nm

TABLEAU 3.2 – Décroissance d'un pore dans du CMSX-4 à 1561 K. Paramètres utilisés.

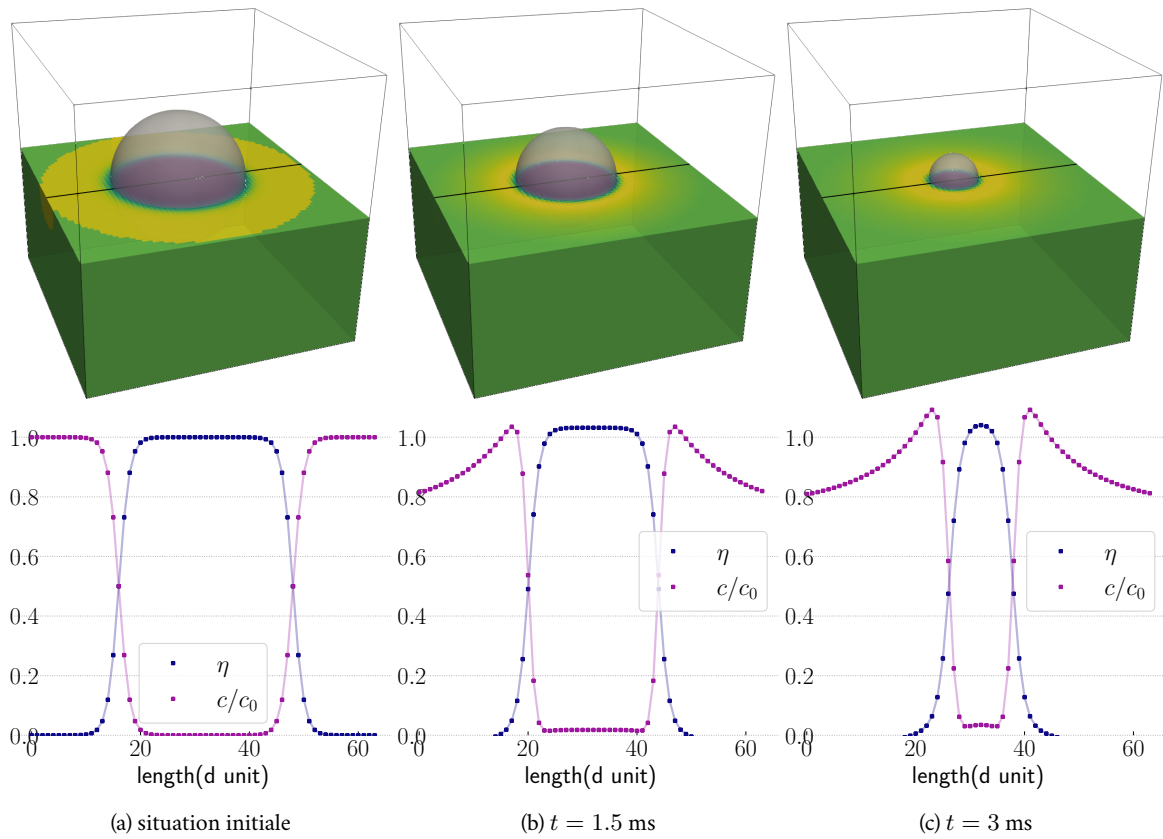


FIGURE 3.3 – Fermeture d'un pore dans du CMSX-4 à 1561 K. Les contributions élastiques sont considérées comme négligeables et ne sont pas prises en compte. Visualisation 3D du champ de concentration et de l'iso-surface  $\eta = 0.5$ . Les profils sont tracés le long de la ligne noire visible sur les visualisations 3D.

La [figure 3.3](#) montre l'évolution des champs  $\eta$  et  $c/c_0$  au cours de la fermeture du pore. Sur des



cartes 3D du champ  $c/c_0$  apparaît également l'iso-surface  $\eta = 0.5$  qui marque la surface du pore. Pour chaque carte sont tracés les profils  $\eta$  et  $c/c_0$  le long d'une ligne marquée en noir sur les cartes. Nous remarquons une sursaturation en lacunes à proximité de l'interface courbe du pore qui correspond à l'effet Gibbs-Thompson. Nous discutons quantitativement de cet effet dans la [section 3.1.4](#) qui suit. Nous remarquons également que le champ de concentration n'est pas nul lorsque  $\eta = 1$ , *ie* lorsque nous sommes dans le pore. La démarche menée dans la [section 3.1.4](#) permet d'expliquer quantitativement la valeur du champ de concentration dans le pore par rapport à la sur-saturation observée à la surface du pore.

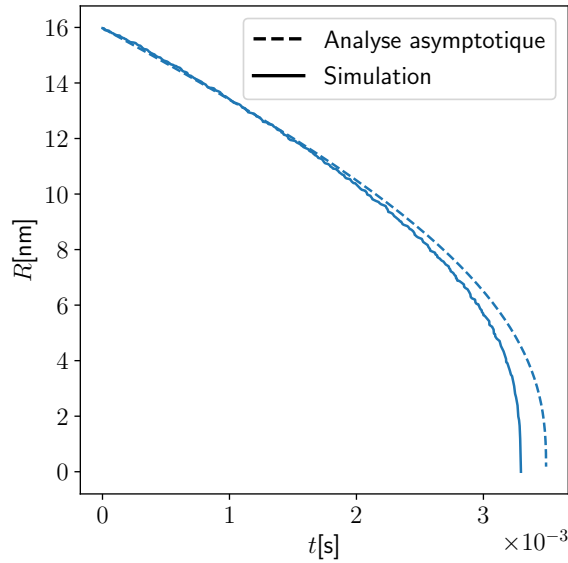


FIGURE 3.4 – Fermeture d'un pore dans du CMSX-4 à 1561 K (voir [figure 3.3](#) et [tableau 3.2](#)). Courbe  $R(t)$ . Comparaison à l'analyse asymptotique (voir [équation \(3.40\)](#)). Le rayon du pore au cours de la simulation est calculé à partir du volume du pore, obtenu par sommation de chaque pixel où  $\eta \geq 0.5$ , soit  $V = \sum_{\eta \geq 0.5} dV$ .

Dans la [figure 3.4](#), nous comparons l'évolution  $R(t)$  du rayon à celle obtenue par analyse asymptotique (voir [équation \(3.40\)](#)). Nous pouvons constater qu'approche asymptotique et simulation s'accordent parfaitement – les deux courbes sont superposées – jusqu'à  $R \sim 10$  nm. Pour cette simulation, le rayon critique  $R_c = 7$  nm (voir [équation \(3.46\)](#)). En deçà d'environ 10 nm, le rayon  $R$  devient comparable à l'épaisseur d'interface, l'épaisseur de celle-ci ayant été choisie de manière à ce qu'elle soit résolue avec environ 6 points de la grille, dont le pas  $d$  est égal à 1 nm. La solution champ de phase ne peut alors être comparée à l'analyse asymptotique, puisque cette dernière n'est alors plus recevable, l'épaisseur de l'interface n'étant plus négligeable devant le rayon du pore.

Nous souhaitons enfin apporter un dernier commentaire à l'analyse numérique ici présentée. Dans [Geslin \[2013\]](#), l'équation cinétique régissant l'évolution du champ  $c$  est intégrée simultanément à celles régissant l'évolution des autres champs. L'évolution conjointe de l'ensemble des champs est ainsi limitée par le temps caractéristique le plus petit, soit celui associé à l'évolution des lacunes  $t_0$  (voir [section 2.2.2](#)). La résolution numérique de l'équilibre chimique peut désormais se faire *via* un algorithme de point fixe.

Nous fixons désormais un pas de temps de  $\sim 10^3 t_0$  là où  $0.1 t_0$  nous limitait en l'absence de point fixe. Dans les simulations que nous avons faites, passées les itérations initiales, l'algorithme n'a besoin que de 0.5 itérations en moyenne pour mettre à jour le champ de concentration en lacunes. Nous avons donc gagné 4 ordres de grandeurs sur les temps de calculs en utilisant et en résolvant judicieusement  $\dot{c} = 0$ . La cinétique de fermeture n'est pas altérée comme nous le montrons [figure 3.4](#). Il s'agit là d'une amélioration majeure et qui nous donne accès à des plages de temps simulables beaucoup plus importantes. Nous pouvons en particulier désormais envisager de réaliser une étude complète sur le recuit de cavités de tailles nanométriques dans un temps de simulation compatible avec la durée d'une thèse comme ce sera fait [chapitre 4](#).

### 3.1.4 Analyse quantitative de l'effet Gibbs-Thomson

Dans cette section, nous décrivons quantitativement l'effet Gibbs-Thomson observé lors de la fermeture d'un pore par diffusion de lacunes dans une matrice. Notre raisonnement s'inspire de la trame établie par Guillaume Boussinot dans sa thèse [[Boussinot, 2007](#)]. Nous décrivons le système étudié ainsi que les équations d'évolution associées. Puis, en traitant séparément le domaine des interfaces et le domaine de la matrice, nous proposerons une résolution analytique de ces équations. Nous rattachons enfin ces résolutions à notre modèle en affectant aux différents paramètres leurs valeurs littérales et numériques, dans le cadre spécifique de ces travaux de thèse.

Comme précédemment, nous nous plaçons dans le cas d'une matrice à l'intérieur de laquelle évolue un pore de rayon  $R$ . La concentration à l'infini en lacunes de la matrice  $c_\infty$  est fixée. Nous introduisons deux champs,  $c$  et  $\eta$ , qui représentent respectivement la concentration en lacunes et la présence du pore. Associé à ce système thermodynamique, nous introduisons l'énergie de Gibbs  $\mathcal{F} = \int_\Omega f(c, \eta)$ , où  $f(c, \eta)$  est la densité d'énergie libre. La somme  $\psi$  des champs  $c$  et  $\eta$  est conservée. Le système d'équations suivant dirige l'évolution du système :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\eta}{dt} = -L_\eta \left( \frac{\partial f}{\partial \eta} - B\nabla^2 \eta - \frac{\partial f}{\partial c} \right) \end{array} \right. \quad (3.54)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dc}{dt} = M\nabla^2 \frac{\partial f}{\partial c} + L_\eta \left( \frac{\partial f}{\partial \eta} - B\nabla^2 \eta - \frac{\partial f}{\partial c} \right) \end{array} \right. \quad (3.55)$$

où  $L_\eta$ ,  $B$  et  $M$  sont des paramètres du modèle (voir [Annexe A](#)). Nous supposons notre système à l'équilibre quasi-statique et nous nous mettons dans l'hypothèse de l'équilibre local déjà discutée plus haut (voir [section 3.1.2.1](#)), ce qui correspond à la limite  $L_\eta \rightarrow +\infty$ . Ceci nous permet de simplifier les [équations \(3.54\) et \(3.55\)](#) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial f}{\partial \eta} - B\nabla^2 \eta - \mu = 0 \end{array} \right. \quad (3.56)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla^2 \mu = 0 \end{array} \right. \quad (3.57)$$

où  $\mu = \partial f / \partial c$ , le potentiel chimique.

L'évolution du pore est pilotée par la diffusion des lacunes présentes dans la matrice. On peut donc raisonnablement supposer que la concentration en lacunes et la valeur du champ  $\eta$  loin des interfaces sont proches de leurs valeurs d'équilibre, que nous rappelons ci-après. Dans le pore,  $\eta = 1$  et  $c = 0$ . Dans la matrice  $\eta = 0$  et  $c = c_0$ . Dans ces régions, on peut linéariser le potentiel chimique  $\mu$  :

$$\mu \simeq \left. \frac{\partial f}{\partial c} \right|_{c_{eq}, \eta_{eq}} + \left. \frac{\partial^2 f}{\partial c^2} \right|_{c_{eq}, \eta_{eq}} (c - c_{eq}) + \left. \frac{\partial^2 f}{\partial c \partial \eta} \right|_{c_{eq}, \eta_{eq}} (\eta - \eta_{eq}) \quad (3.58)$$

où  $c_{eq}$  et  $\eta_{eq}$  sont les valeurs d'équilibre des champs  $c$  et  $\eta$ . Nous étudions désormais l'équation (3.56) au travers de l'interface du pore. La résolution des équations (3.56) et (3.57) dans ce domaine conduira à une solution pour le potentiel chimique  $\mu$  que nous utiliserons ensuite comme condition limite lors de la résolution de ces mêmes équations loin de l'interface et que nous explicitons maintenant. Loin de l'interface nous pouvons négliger le terme  $\nabla^2 \eta$ . Les équations (3.56) et (3.57) se simplifient alors comme suit :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial f}{\partial \eta} = \frac{\partial f}{\partial c} \\ \nabla^2 \frac{\partial f}{\partial c} = 0 \end{array} \right. \quad (3.59)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial f}{\partial \eta} = \frac{\partial f}{\partial c} \\ \nabla^2 \frac{\partial f}{\partial c} = 0 \end{array} \right. \quad (3.60)$$

Nous notons  $\mathbf{g}$  (vecteur unitaire) la normale à la surface qui passe par le point  $\mathbf{r}$  et  $g$  la coordonnée le long de  $\mathbf{g}$ . Nous avons l'équation suivante :

$$\nabla \eta = \frac{\partial \eta}{\partial g} \mathbf{g} \quad \Rightarrow \quad \nabla^2 \eta = \frac{\partial^2 \eta}{\partial g^2} + \frac{\partial \eta}{\partial g} \nabla \cdot \mathbf{g} \quad (3.61)$$

Nous développons l'équation (3.56) et nous la multiplions par  $\partial \eta / \partial g$ . Nous obtenons la relation suivante :

$$\frac{\partial \eta}{\partial g} \frac{\partial f}{\partial \eta} - B \frac{\partial^2 \eta}{\partial g^2} \frac{\partial \eta}{\partial g} - B \left( \frac{\partial \eta}{\partial g} \right)^2 \nabla \cdot \mathbf{g} - \mu \frac{\partial \eta}{\partial g} = 0 \quad (3.62)$$

Nous rappelons que nous avons  $\mu = \partial f / \partial c$ . Nous multiplions cette quantité par  $\partial c / \partial g$ . Nous additionnons les deux relations précédentes et en les intégrant au travers de l'interface, nous obtenons la relation suivante :

$$\mu_{int} = \frac{\Delta f_{int}}{\Delta \eta_{int} + \Delta c_{int}} - \kappa \frac{\gamma}{\Delta \eta_{int} + \Delta c_{int}} \quad (3.63)$$

où  $\mu_{int}$  est le potentiel chimique sur l'interface,  $\Delta \eta_{int}$ ,  $\Delta c_{int}$  et  $\Delta f_{int}$  sont les variations des quantités considérées à travers l'interface, orientée par  $\vec{g}$  et de courbure  $\kappa$  :

$$\begin{aligned} \Delta \eta_{int} &= \eta^+ - \eta^- \\ \Delta c_{int} &= c^+ - c^- \\ \Delta f_{int} &= f^+ - f^- \\ \kappa &= \nabla \cdot \mathbf{g} \end{aligned}$$

et où  $\gamma = B \int_{-}^{+} \left( \frac{\partial \eta}{\partial g} \right)^2 dg$  est l'énergie d'interface. Les symboles "+" et "-" signifient que les quantités considérées sont exprimées au voisinage immédiat de l'interface. Les quantités exprimées aux voisinage de l'interface sont pas imposées et ne sont donc pas connues de manière exacte. Afin de pouvoir exploiter l'équation (3.63), nous allons maintenant estimer ces quantités. Nous allons pour cela supposer

que les champs  $\eta$  et  $c$ , pris au voisinage de l'interface, sont proches de leur valeur d'équilibre :

$$\begin{aligned}\delta\eta^- &= \eta^- - 1 \ll 1 \\ \delta\eta^+ &= \eta^+ - 0 \ll 1 \\ \delta c^- &= c^- - 0 \ll c_0 \\ \delta c^+ &= c^+ - c_0 \ll c_0\end{aligned}\tag{3.64}$$

Dans le cadre de ces hypothèses, il est facile de montrer que les variations  $\Delta f_{int}$ ,  $\Delta c_{int}$  et  $\Delta\eta_{int}$  au travers de l'interface vérifient :

$$\frac{\Delta f_{int}}{\Delta\eta_{int} + \Delta c_{int}} = \mu_{eq} + o\left(\delta\eta^{+2}, \delta\eta^{-2}, \delta c^{+2}, \delta c^{-2}, \delta\eta^+ \delta\eta^-, \delta\eta^+ \delta c^+, \delta\eta^+ \delta c^-, \delta\eta^- \delta c^+, \delta\eta^- \delta c^-, \delta c^+ \delta c^-\right)\tag{3.65}$$

$$\frac{1}{\Delta\eta_{int} + \Delta c_{int}} = \frac{1}{\Delta\eta_{eq} + \Delta c_{eq}} + o\left(\delta\eta^+, \delta\eta^-, \delta c^+, \delta c^-\right)\tag{3.66}$$

où  $\mu_{eq}$  est le potentiel chimique d'équilibre entre le pore et la matrice.  $\Delta c_{eq} = c_0 - 0$  et  $\Delta\eta_{eq} = 0 - 1$ . Les équations (3.65) et (3.66) nous permettent de simplifier l'équation (3.63) de la manière suivante :

$$\mu_{int} \simeq \mu_{eq} - \kappa \frac{\gamma}{\Delta\eta_{eq} + \Delta c_{eq}}\tag{3.67}$$

Nous retrouvons ici un résultat analogue à celui obtenu dans la thèse de Guillaume Boussinot où seul le champ  $c$  était considéré. Dans le cas présent où un champ  $\eta$  est introduit pour rendre compte de la présence du pore, nous retrouvons une contribution qui provient de ce champ du fait de la contrainte de conservation du champ  $\psi = c + \eta$ . Nous pouvons désormais résoudre l'équation (3.57), avec, pour conditions aux limites, l'équation (3.67) en  $r = R$ , et  $\mu(r = R_\infty) = \frac{\partial f}{\partial c}\Big|_{\eta=0, c=c_\infty} = \mu_\infty$  :

$$\begin{cases} r \geq R & \mu(r) = \mu_\infty + (\mu_{eq} - \mu_\infty) \frac{R}{r} - \frac{d-1}{r} \frac{\gamma}{\Delta\eta_{eq} + \Delta c_{eq}} \\ r \leq R & \mu(r) = \mu_{eq} - \frac{d-1}{R} \frac{\gamma}{\Delta\eta_{eq} + \Delta c_{eq}} \end{cases}\tag{3.68}$$

$$\tag{3.69}$$

où  $d$  est la dimension du système. Le potentiel chimique est constant dans le pore, continu à travers l'interface, et converge en  $1/r$  vers sa valeur en l'infini dans la matrice.

Nous calculons les profils  $c(r)$  et  $\eta(r)$ . Nous les déterminons en premier lieu à l'intérieur du pore. Nous supposons que la concentration et le champ  $\eta$  à l'intérieur du précipité sont proches de leurs valeurs d'équilibres, soit 0 et 1 respectivement dans notre cas. Nous pouvons ainsi utiliser l'équation (3.58). Nous obtenons ainsi l'équation suivante :

$$r \leq R : \quad \frac{\partial^2 f}{\partial c^2}\Big|_{c=0, \eta=1} (c(r) - 0) + \frac{\partial^2 f}{\partial c \partial \eta}\Big|_{c=0, \eta=1} (\eta(r) - 1) = -\frac{d-1}{R} \frac{\gamma}{\Delta\eta_{eq} + \Delta c_{eq}}\tag{3.70}$$

En remplaçant les expressions des dérivées partielles et en considérant que  $c_0 \ll 1$ , nous obtenons la relation suivante :

$$r \leq R \quad \frac{c(r)}{c_0} + \eta(r) - 1 = \frac{(d-1)}{c_0} \frac{1}{D} \frac{d_0}{R},\tag{3.71}$$

où  $d_0$  est la longueur capillaire déjà introduite [équation \(3.26\)](#) et dont nous rappelons ici l'expression lorsque  $c_0 \ll 1$  :

$$d_0 = \frac{\Omega\gamma c_0}{k_B T} \quad (3.72)$$

Nous retrouvons à nouveau une expression proche de celle trouvée dans [Boussinot \[2007\]](#). Au lieu de raisonner sur le champ de concentration seul, comme c'est le cas dans les travaux de Guillaume Boussinot, nous raisonnons sur la somme conservée des champs  $c$  et  $\eta$ . La somme  $\tilde{c} + \eta$  est constante dans le pore. Par ailleurs, en considérant que le champ  $\eta$  est égal à 1 dans le pore, nous obtenons la relation suivante :

$$c^- = (d-1) \frac{1}{D} \frac{d_0}{R} \quad (3.73)$$

Cette relation confirme la conclusion déjà établie auparavant et selon laquelle l'effet Gibbs-Thomson impose une concentration résiduelle en lacunes dans le pore. Pour qu'il n'y ait pas de lacune, comme on s'y attendrait physiquement, le facteur  $D$ , qui contrôle la courbure de l'énergie libre chimique dans le pore, doit être infini. Numériquement cependant, une valeur finie doit être prise. Il n'est donc numériquement pas possible de retirer l'ensemble des lacunes au sein du pore. Nous montrons donc que la présence de ces lacunes est inéluctable (mais contrôlable par la courbure  $D$ ) et trouve son origine dans l'effet Gibbs-Thompson qui est d'autant plus prononcé que le rayon de courbure est petit (pas d'effet pour une interface plane). Cet effet ne semble pas avoir attiré l'attention des auteurs dans d'autres études [[Rokkam et al., 2009](#)]. Il doit cependant survenir même si cela n'est pas visible dans les profils de concentration montrés dans les articles.

Nous souhaitons désormais déterminer les profils des champs à l'extérieur du pore. Nous commençons par calculer la concentration  $c^+$  au pied de l'interface. Toujours en supposant que les champs pris aux abords immédiats de l'interface ne s'éloignent pas trop de leurs valeurs d'équilibres respectives, nous pouvons linéariser le potentiel chimique (voir [équation \(3.58\)](#)). Nous appliquons ensuite la condition aux limites exprimée [équation \(3.67\)](#). Nous obtenons ainsi la relation suivante :

$$\left. \frac{\partial^2 f}{\partial c^2} \right|_{c=c_0, \eta=0} (c^+ - c_0) + \left. \frac{\partial^2 f}{\partial c \partial \eta} \right|_{c=c_0, \eta=0} (\eta^+ - 0) = -\frac{d-1}{R} \frac{\gamma}{\Delta\eta_{eq} + \Delta c_{eq}} \quad (3.74)$$

Toujours utilisant  $c_0 \ll 1$ , ce qui nous permet de simplifier  $\Delta\eta_{eq} + \Delta c_{eq} = -1$ , nous obtenons l'équation suivante :

$$\frac{c^+}{c_0} + \eta^+ - 1 = \frac{(d-1) d_0}{c_0 R} \quad (3.75)$$

En considérant  $\eta^+ = 0$ , nous obtenons la relation suivante :

$$c^+ - c_0 = (d-1) \frac{d_0}{R} = D c^- \quad (3.76)$$

Nous retrouvons la [équation \(3.24\)](#). Pour avoir une description plus complète des profils de champs pour  $r \geq R$ , nous pouvons utiliser l'[équation \(3.68\)](#) pour  $r$  proche de  $R$  et  $r$  proche de  $R_\infty$ , seuls domaines où nous possédons les hypothèses nous permettant de linéariser le potentiel chimique. Nous

aboutissons aux profils de champs suivants :

$$r \gtrsim R, \quad \left( \frac{c(r)}{c_0} - \frac{c^+}{c_0} \right) + \left( \eta(r) - \eta^+ \right) = \frac{(d-1)}{c_0} d_0 \left( 1 - \frac{R}{\overline{R}_c} \right) \left( \frac{1}{r} - \frac{1}{R} \right) \quad (3.77)$$

$$r \lesssim R_\infty, \quad \frac{c(r)}{c_0} - \frac{c_\infty}{c_0} + \left[ (D-1) \left( \frac{c_\infty}{c_0} - 1 \right) + 1 \right] \eta(r) = \frac{(d-1)}{c_0} \left( 1 - \frac{R}{\overline{R}_c} \right) \frac{d_0}{r} \quad (3.78)$$

où nous avons défini le rayon algébrique  $\overline{R}_c$  de la manière suivant :

$$\overline{R}_c = \frac{(d-1) d_0}{c_\infty - c_0} \quad (3.79)$$

Ce rayon peut en particulier être négatif en cas de sous-saturation. Dans ce cas, seule sa valeur absolue a un sens et délimite deux régimes différents de décroissance (voir [section 3.1.2.1](#)). Il s'agit du rayon de coupure déjà défini [équation \(3.46\)](#). Ce rayon, qui ressort naturellement dans l'analyse que nous menons, possède les mêmes significations physiques que celles décrites dans notre analyse asymptotique. En particulier, dans le cas d'une sur-saturation aux bords,  $R_c$  définit un rayon pour le lequel le pore ne grossit ni ne se ferme (voir l'analyse faite [section 3.1.2.1](#)).

Pour obtenir la vitesse de fermeture du pore, nous reprenons les [équations \(3.54\) et \(3.55\)](#). La vitesse de l'interface  $dR/dt$  est alors donnée par la relation suivante :

$$\left( \eta^- - \eta^+ + c^- - c^+ \right) \frac{dR}{dt} = - \left( \mathbf{j}^+ - \mathbf{j}^- \right) \quad (3.80)$$

où  $\mathbf{j} = -M \nabla \mu$ . Les [équations \(3.68\) et \(3.69\)](#) nous permettent de calculer  $\mathbf{j}^+$  et  $\mathbf{j}^-$  :

$$j^+ = M (\mu_{eq} - \mu_\infty) \frac{1}{R} - M \frac{d-1}{R^2} \frac{\gamma}{\Delta \eta_{eq} + \Delta c_{eq}} \quad (3.81)$$

$$j^- = 0 \quad (3.82)$$

Nous avons vu qu'à des termes d'ordre  $1/R$  près, les quantités  $\eta^+$ ,  $\eta^-$ ,  $c^+$  et  $c^-$  sont égales à leurs valeurs d'équilibre. En rappelant également que sous l'hypothèse  $c_0 \ll 1$ ,  $\Delta \eta_{eq} + \Delta c_{eq} = -1$ , nous obtenons la vitesse de fermeture suivante :

$$\frac{dR}{dt} = M (\mu_\infty - \mu_{eq}) \frac{1}{R} - M \frac{d-1}{R^2} \gamma \quad (3.83)$$

Nous pouvons enfin remanier cette relation pour aboutir à l'équation suivante :

$$\frac{dR}{dt} = M(d-1) \gamma \frac{1}{R} \left( \frac{1}{\overline{R}_c} - \frac{1}{R} \right) \quad (3.84)$$

Cette vitesse est exactement la même que celle déterminée dans le cadre de notre analyse asymptotique, dans le cadre suivant :  $R_\infty \gg R$ ,  $c_0 \ll 1$  et absence d'effets élastiques.

Nous comparons [figure 3.5](#) la démarche théorique que nous venons de mener et des profils  $c$  et  $\eta$  extraits des simulations dans le CMSX-4 montrées [figure 3.3](#). Nous pouvons voir que  $c^+$  calculé *via* notre démarche est très proche (écart inférieur au pourcent) de la concentration effectivement atteinte

dans nos simulations. Nous voyons en revanche que le profil théorique attendu pour  $r \gtrsim R$  est assez éloigné de celui observé dans nos simulations. Ceci est sûrement dû au fait que nous ne réunissons pas toutes les hypothèses nécessaires à l'établissement des lois données plus haut. En particulier, nous avons ici  $R_\infty = 2R$  et  $c_\infty = 0.8c_0$  alors que les formules analytiques sont obtenues avec les hypothèses  $R_\infty \gg R$  et  $c_\infty \approx c_0$ .

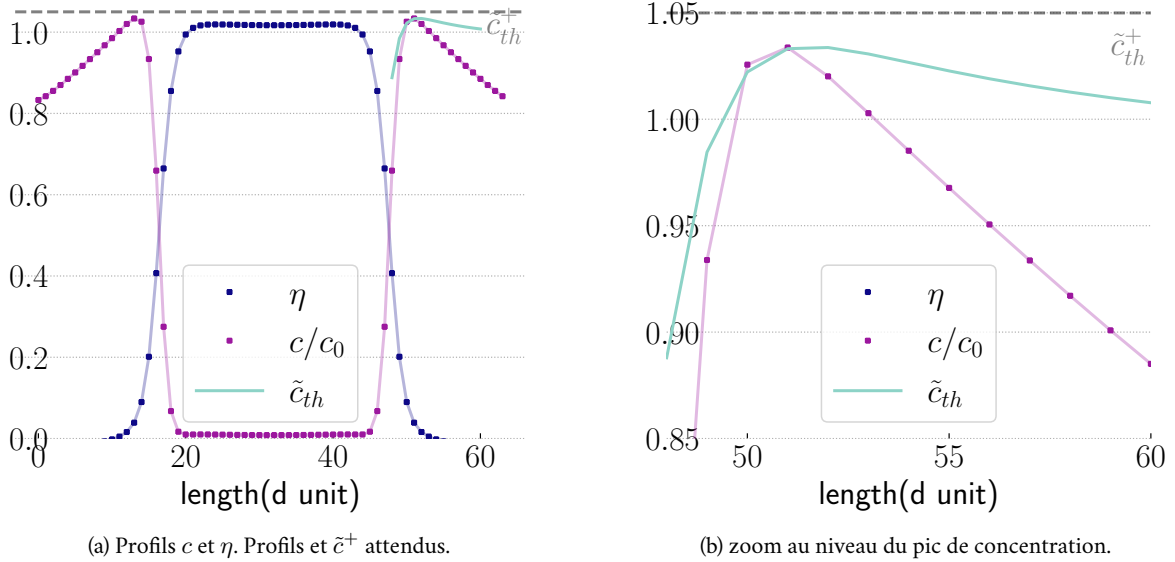


FIGURE 3.5 – Fermeture d'un pore dans du CMSX-4 à 1561 K (voir figure 3.4). Profils à  $t = 0.15$  ms.

### 3.1.5 Conclusion

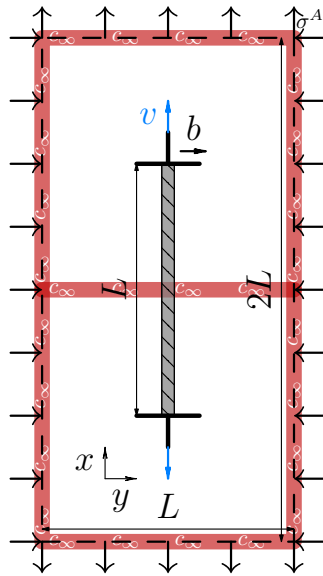
Dans le cadre de l'interaction d'un pore avec un champ de lacunes, nous avons souhaité comprendre l'influence des différents paramètres numériques de notre modèle. Nous avons construit pour cela une situation « modèle » grâce à laquelle nous disposons de formules analytiques. Nous avons réalisé en particulier une analyse asymptotique de notre modèle de manière à comprendre et fixer en conséquence le rôle des différents paramètres numériques. Dans le cadre de la fermeture d'un pore de taille nanométrique dans du CMSX-4, nous avons pu faire correspondre courbes théoriques et simulations, au moins dans les domaines de validité qui nous avaient permis de bâtir notre analyse. Nous avons pu voir que les prédictions analytiques sont relativement bonnes même en dehors de ces domaines. Dans un second temps, nous avons réalisé une autre approche analytique afin de quantifier l'effet Gibbs-Thomson retranscrit par notre modèle. Nous avons ainsi confirmé des résultats obtenus par analyse asymptotique mais également confirmé le bon comportement de notre modèle, désormais correctement « étalonné ». Nous souhaitons désormais vérifier le comportement du modèle dans la simulation de montée de dislocations.

## 3.2 Étude de la montée de dislocation

Nous étudions désormais la montée de dislocations. Nous adoptons pour cela une démarche similaire à celle que nous venons de mener pour vérifier le comportement de notre modèle sur la fermeture

de pores. Nous définissons tout d'abord un cadre de simulation grâce auquel il est possible de comparer nos simulations à une prédiction analytique. Nous détaillons au préalable la démarche menant à l'obtention de cette formule analytique. Puis, dans un second temps, nous montrons des résultats de simulations et les comparons à l'analyse asymptotique. Dans le cas spécifique de la montée de dislocations sans couplage avec un pore, notre modèle est analogue à celui introduit dans Geslin [2013] et Geslin *et al.* [2014b] pour lequel une analyse asymptotique a déjà été proposée.

Nous définissons figure 3.6 la simulation qui nous sert de cadre pour toute cette section. Nous nous plaçons à deux dimensions. Une dislocation coin monte dans un plan  $y = 0$  au sein d'un carré de côté  $L$ . Une contrainte extérieure  $\varrho^A = \sigma^A(-\mathbf{i} \otimes \mathbf{i} + \mathbf{j} \otimes \mathbf{j})$  peut être appliquée. Une concentration  $c_\infty$  peut également être appliquée en bord de boîte de simulation. En raison des conditions aux limites périodiques, nous dupliquons le carré décrit précédemment de la manière décrite dans la figure 3.6. De manière à pouvoir nous comparer aux résultats obtenus dans Geslin *et al.* [2014b], nous réalisons nos simulations dans de l'aluminium. Les paramètres matériaux correspondants sont donnés Annexe B. Nous négligeons enfin la contraction induite par la présence de lacunes. Nous fixons donc  $V^* = 0$ .



pas de grille $d$	0.285 nm
largeur d'interface $w_d$	1.71 nm
Taille de boîte de simulation $L$	18.2 nm

FIGURE 3.6 – Montée d'un dipôle de dislocations coins. La bande hachée au centre représente la plaquette de champ  $\phi = 1$  dans le plan de montée  $y = 0$ . Une concentration  $c_\infty$  est appliquée aux bords de la boîte de simulation ainsi que sur une bande au milieu. Une contrainte  $\varrho^A = \sigma^A \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$  peut être appliquée.

### 3.2.1 Analyse asymptotique

Nous redonnons ci-après les équations d'évolution du champ  $\phi$  dans le cadre de la montée uniquement, sans interaction avec un pore (voir équation (2.38)) :

$$\dot{\phi} = -L_\phi \int_L \left\{ \frac{\partial f_{\text{tot}}}{\partial \phi} - \nabla \frac{\partial f_{\text{tot}}}{\partial \nabla \phi} - b \frac{\partial f_{\text{tot}}}{\partial c} \delta(y) \right\} dy \quad (3.85)$$



où  $f_{\text{tot}}$  est la densité d'énergie totale, que nous rappelons ici :

$$\begin{aligned}
 f_{\text{tot}} &= \frac{k_B T}{2\Omega c_0} (c - c_0)^2 & f_{\text{chem}} \\
 &+ \left( \frac{\pi \Gamma_d}{8w_d} (1 - \cos(2\pi\phi)) + \frac{\pi}{4} \Gamma_d w_d |\nabla_x \phi|^2 \right) \delta(y) & f_{\text{dislo}} \\
 &+ \frac{1}{2} C_{ijkl} [\epsilon_{ij} - \epsilon_{ij}^0(\phi, c)] [\epsilon_{kl} - \epsilon_{kl}^0(\phi, c)] - \sigma_{ij}^A \bar{\epsilon}_{ij} & f_{\text{elas}}
 \end{aligned} \tag{3.86}$$

L'équation d'évolution du champ  $\phi$  devient ainsi :

$$\dot{\phi} = -L_\phi \left\{ \frac{\pi^2 \Gamma_d}{4w_d} \sin(2\pi\phi) - \frac{\pi}{2} \Gamma_d w_d \nabla_x^2 \phi - b \frac{k_B T}{\Omega c_0} (c - c_0) - \sigma_{ij}(x, y=0) \epsilon_{ij}^{0,d} h(\phi) \right\}. \tag{3.87}$$

Dans le cas présent, nous avons  $\epsilon_{ij}^{0,d} = b \delta_{i2} \delta_{j2}$ , où  $\delta$  est le symbole de Kronecker.

Nous approchons la situation simulée et décrite [figure 3.6](#) par la situation décrite [figure 3.7](#). Le

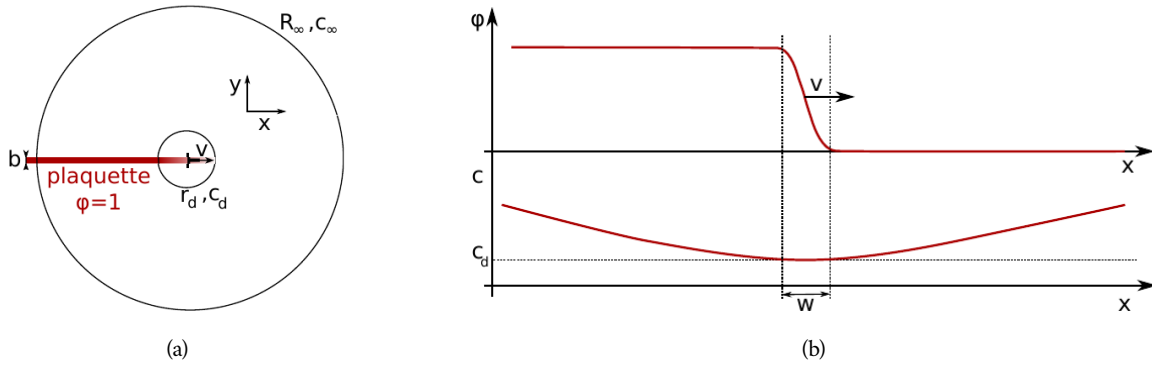


FIGURE 3.7 – Figures et légende tirées de [Geslin \[2013\]](#). Configuration considérée présentant une dislocation isolée. (a) Une plaquette d'épaisseur  $b$  où  $\phi = 1$  est introduite le long de l'axe  $x$ . On considère que la diffusion des lacunes a lieu dans un cylindre creux de rayons  $r_d$  et  $R_\infty$  où les conditions aux limites sont données par  $c_d$  et  $c_\infty$ . (b) Profil des champ  $\phi(x)$  et de concentration en lacunes  $c(x)$  le long de l'axe de la plaquette.

cœur de la dislocation est placé au centre d'un disque de rayon  $R_\infty$ . Le cœur lui-même est délimité par un disque de rayon  $r_d$ . La diffusion des lacunes a lieu dans l'espace entre  $r_d$  et  $R_\infty$ . Nous appelons  $c_d = c(r_d)$  et  $c_\infty = c(R_\infty)$  les conditions aux limites de ce domaine de diffusion.

Dans un premier temps, nous définissons le profil  $\phi_0$  qu'adopterait le champ  $\phi$  en l'absence de contrainte appliquée et en présence d'un champ de lacunes homogène de concentration  $c_0$ . Ce champ est donc la solution de l'équation suivante :

$$\frac{\pi^2 \Gamma_d}{4w_d} \sin(2\pi\phi_0) - \frac{\pi}{2} \Gamma_d w_d \nabla_x^2 \phi_0 + b \sigma_{22}(x, \phi_0) h'(\phi_0) = 0, \tag{3.88}$$

où la contrainte  $\sigma_{22}$  est la contrainte générée par la dislocation elle-même. En raison de la présence de ce terme, la résolution de l'équation (3.88) est complexe. On peut cependant facilement se convaincre que, loin du cœur de la dislocation, le champ  $\phi$  tend vers 1 à l'intérieur de la plaquette et vers 0 dans la

matrice.

Nous considérons désormais que la dislocation se déplace sous l'action de forces motrices. Celles-ci peuvent être d'origine chimique par l'application d'une concentration en lacunes  $c_\infty \neq c_0$  aux bords du système, ou d'origine mécanique par l'application d'une contrainte  $\sigma^A$ , dont nous considérons que seule la composante  $\sigma_{22}^A$  est non nulle. Nous la notons simplement  $\sigma^A$ . Nous faisons l'hypothèse que le profil du champ  $\phi$  ne s'éloigne pas beaucoup du profil  $\phi_0$  alors que la dislocation monte. Nous posons ainsi  $\phi(x, t) = \phi_0(x - vt)$  où  $v$  est la vitesse de montée de la dislocation.  $\phi$  vérifie l'équation (3.85) et nous pouvons écrire :

$$-v \frac{\partial \phi_0}{\partial x} = -L_\phi \left( \frac{\pi^2 \Gamma_d}{4w_d} \sin(2\pi \phi_0) - \frac{\pi}{2} \Gamma_d w_d \nabla_x^2 \phi_0 + b \sigma_{22}(x, \phi_0) h'(\phi_0) - b \mu(c_d) \right). \quad (3.89)$$

La contrainte  $\sigma_{22}$  se décompose en deux contributions. D'une part la contrainte générée par la dislocation elle-même et d'autre part la contrainte appliquée. Nous écrivons ainsi  $\sigma_{22} = \sigma_{22}^d + \sigma^A$ . En rappelant que le profil  $\phi_0$  est solution de l'équation (3.88), cette décomposition nous permet de simplifier les termes centraux de l'équation (3.89). Nous obtenons ainsi l'équation suivante :

$$-v \frac{\partial \phi_0}{\partial x} = -L_\phi b (\sigma^A h'(\phi_0) - \mu(c_d)). \quad (3.90)$$

Nous multiplions cette relation par  $\partial \phi_0 / \partial x$  et nous intégrons dans le domaine interfacial  $\mathcal{J}$ . En faisant l'hypothèse raisonnable que la fonction  $\partial \phi_0 / \partial x$ , qui représente le cœur de la dislocation, est suffisamment localisée vis à vis des variations du potentiel chimique (voir figure 3.7b), nous obtenons :

$$-v \int_{\mathcal{J}} \left( \frac{\partial \phi_0}{\partial x} \right)^2 dx = -L_\phi b \sigma^A \int_{\mathcal{J}} h'(\phi_0) \frac{\partial \phi_0}{\partial x} dx + L_\phi b \mu(c_d) \int_{\mathcal{J}} \frac{\partial \phi_0}{\partial x} dx \quad (3.91)$$

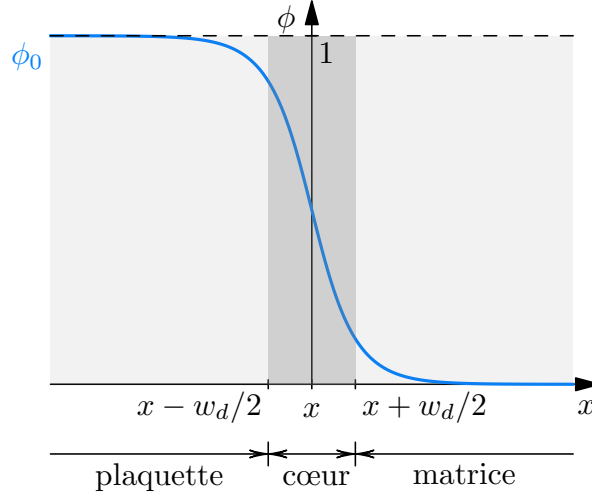
En utilisant la propriété selon laquelle le champ  $\phi_0$ , loin du cœur, tend vers 0 ou 1, cette équation devient :

$$-v \int_{\mathcal{J}} \left( \frac{\partial \phi_0}{\partial x} \right)^2 dx = L_\phi b \sigma^A - L_\phi b \mu(c_d) \quad (3.92)$$

Nous devons maintenant calculer l'intégrale qui apparaît dans le membre de gauche de cette équation. Il est évident qu'à un facteur numérique près, cette intégrale est proportionnelle à la largeur du cœur de la dislocation. De manière à obtenir une expression analytique de cette intégrale, nous faisons l'hypothèse, vérifiée par la suite dans nos simulations, que l'élasticité a peu d'influence sur la forme de  $\phi_0$ . Nous pouvons donc négliger le terme  $b \sigma_{22}(x, \phi_0) h'(\phi_0)$  dans l'équation (3.88). Nous obtenons l'expression ci-après :

$$\phi_0(x) = \frac{2}{\pi} \arctan \left( \exp \left( \frac{\pi x}{w_d} \right) \right) \quad (3.93)$$

Cette solution est représentée figure 3.8.


 FIGURE 3.8 – Profil  $\phi_0$ 

En utilisant l'équation (3.93), nous pouvons calculer l'intégrale du membre de gauche de l'équation (3.91) et nous aboutissons à la relation suivante :

$$v = \frac{\pi w_d}{2} L_\phi b \left( \frac{k_B T}{\Omega c_0} (c_d - c_0) - \sigma^A \right). \quad (3.94)$$

Nous avons donc une première expression de la vitesse de montée, issue de l'équation cinétique suivie par le champ de phase qui représente la dislocation, le champ  $\phi$ . Il existe évidemment une seconde expression de cette vitesse, car la dislocation ne peut monter qu'en échangeant des lacunes avec la matrice. C'est cette seconde expression que nous allons établir maintenant. Nous rappelons d'abord l'hypothèse selon laquelle l'évolution du champ de concentration est quasi statique par rapport à celle du champ  $\phi$ . Tout comme dans le cadre du pore, nous résolvons ainsi l'équation de Fick  $\nabla^2 c = 0$  entre les rayons  $r_d$  et  $R_\infty$ . Nous déterminons ainsi successivement le profil  $c(r)$  puis la vitesse de montée  $v$  :

$$v = \frac{2\pi D_v}{b \ln(R_\infty/r_d)} (c_\infty - c_d) \quad (3.95)$$

Nous utilisons les deux relations précédentes pour éliminer l'inconnue  $c_d$  :

$$c_d = c_0 \left[ \frac{1 + \frac{\Omega \sigma^A}{k_B T} + \frac{4M}{w_d b^2 L_\phi \ln(R_\infty/r_d)} \frac{c_\infty}{c_0}}{1 + \frac{4M}{w_d b^2 L_\phi \ln(R_\infty/r_d)}} \right] \quad (3.96)$$

Nous obtenons ainsi l'expression de la vitesse de montée suivante :

$$v = \frac{\frac{2\pi D_v c_0}{b} \left( \frac{c_\infty}{c_0} - 1 - \frac{\Omega \sigma^A}{k_B T} \right)}{\ln\left(\frac{R_\infty}{r_d}\right) + \frac{4}{\tilde{L}_\phi \tilde{w}_d \tilde{b}^2}}, \quad (3.97)$$

où les quantités  $\tilde{L}_\phi$ ,  $\tilde{w}_d$  et  $\tilde{b}$  ont été définies dans le [tableau 2.1](#) (voir [section 2.2.1](#)).

Dans cette expression, le coefficient de mobilité  $\tilde{L}_\phi$  qui intervient au dénominateur contrôle physiquement la cinétique d'échange des lacunes entre la matrice et le cœur des dislocations. Dans [Geslin \[2013\]](#) et [Geslin et al. \[2014b\]](#), l'influence de ce paramètre est systématiquement étudiée. Pour des valeurs suffisamment petites, la montée des dislocations est principalement contrôlée par cette cinétique d'échange. Pour des valeurs plus grandes qui tendent vers l'infini, cet échange devient instantané ce qui correspond à l'hypothèse physique dite de « l'équilibre local » où la montée des dislocations n'est alors contrôlée que par la diffusion des lacunes et leur disponibilité à proximité des cœurs. Dans [Geslin et al. \[2015\]](#), un changement d'échelle est réalisé aboutissant à une expression analytique de la mobilité  $\tilde{L}_\phi$  qui relie ce paramètre mésoscopique à des paramètres physiques microscopiques comme la densité de cran sur la ligne de dislocation. Dans ce qui suit, nous faisons l'hypothèse que l'équilibre local est vérifié en considérant  $\tilde{L}_\phi \rightarrow \infty$ . Numériquement, il nous suffit de choisir une valeur suffisamment grande qui garantit que la vitesse donnée [équation \(3.97\)](#) ne dépend plus de  $\tilde{L}_\phi$ . Nous montrons alors que cette condition est vérifiée lorsque :

$$\frac{4}{\tilde{L}_\phi \tilde{w}_d \tilde{b}^2} \ll \ln \left( \frac{R_\infty}{r_d} \right). \quad (3.98)$$

Soit, en prenant  $\tilde{w}_d = 4$  et  $\ln(R_\infty/r_d) \simeq 1$ <sup>2</sup> :

$$\tilde{L}_\phi \gg \frac{1}{\tilde{b}^2}. \quad (3.99)$$

En considérant ce critère d'équilibre local satisfait, nous obtenons la relation suivante :

$$v = \frac{2\pi D_v c_0}{b \ln(R_\infty/r_d)} \left( \frac{c_\infty}{c_0} - 1 - \frac{\Omega \sigma^A}{k_B T} \right). \quad (3.100)$$

L'application d'une contrainte  $\sigma^A$  positive agit dans le sens d'un rapprochement des deux cœurs, de même qu'une sous-saturation, de manière à fournir des lacunes à la matrice. À l'inverse, une sursaturation imposée aux bords agit dans le sens d'un éloignement des cœurs, de manière à absorber des lacunes dans le mouvement de montée. Nous possédons désormais une description analytique de la vitesse de montée dans une configuration spécifique. Nous allons vérifier que notre modèle, une fois les différents paramètres numériques fixés, produit bien une cinétique en accord avec cette vitesse de montée.

### 3.2.2 Simulations numériques

Nous reprenons la démarche établie [section 3.1.3](#) pour calibrer les paramètres intervenant dans la résolution numérique lors de la fermeture d'un pore par diffusion de lacunes. Les paramètres « libres » sont la mobilité  $\tilde{L}_\phi$ , le pas de temps  $\Delta \tilde{t}$  utilisé dans l'équation cinétique sur le champ  $\phi$ , et la précision  $\|dc/d\tilde{t}\|_\infty$  avec laquelle on résout l'équilibre quasi statique sur le champ de concentration. Nous allons choisir ces paramètres de manière à reproduire la vitesse prévue par l'[équation \(3.100\)](#) dans des situations où celle-ci peut servir de référence. Nous venons de déterminer dans la section précédente une condition sur  $\tilde{L}_\phi$  pour que sa valeur reflète une cinétique de montée uniquement contrôlée par

2. ce terme varie lentement avec  $R_\infty$

la diffusion. L'équation (3.99) lie ainsi le choix de  $\tilde{L}_\phi$  et la valeur de la norme du vecteur de Burgers adimensionné  $\tilde{b}$ . Dans les simulations qui suivent, nous fixons  $\tilde{b} = 1$ . Dans l'équation (3.100), le terme  $\ln(R_\infty/r_d)$  est cependant assez difficile à définir. S'il est tentant de l'associer à  $\ln(L/w_d)$ , il nous est cependant impossible de justifier que  $r_d = w_d$ . Nous adoptons donc la démarche suivante : nous prenons comme référence la simulation où  $\tilde{L}_\phi$  est le plus grand possible,  $\Delta\tilde{t}$  le plus petit possible et  $\|dc/d\tilde{t}\|_\infty$  le plus contraignant possible. Logiquement cette simulation est la plus gourmande en temps de calcul. Nous choisissons ensuite le jeu de paramètres qui permet de minimiser le temps de calcul tout en garantissant que la vitesse de montée reste la même, à 5% près, que celle mesurée sur la référence. Les détails de la démarche – jeu de paramètres testés et résultats de simulations – sont donnés dans l'Annexe D. Le jeu de paramètres  $\{\tilde{L}_\phi, \Delta\tilde{t}, \|dc/d\tilde{t}\|_\infty\}$  qui reproduit le mieux la cinétique de montée selon les critères et la démarche explicités plus haut est donné tableau 3.3.

$\tilde{L}_\phi$	$\Delta\tilde{t}$	$\ dc/d\tilde{t}\ _\infty$
10	$10^{-4}$	$10^{-3}$

TABLEAU 3.3 – Paramètres numériques pour la montée de dislocation.

Nous présentons figure 3.9 une simulation de montée d'une dislocation coin selon la configuration précédemment établie (voir figure 3.7) et dans laquelle nous imposons  $\sigma^A = -500$  MPa et  $c_\infty = c_0$ . Nous souhaitons évaluer le bon comportement de notre modèle en vérifiant que nous prédisons une vitesse de montée en accord avec l'équation (3.100). Nous faisons toujours face à la difficulté à définir le terme  $\ln(R_\infty/r_d)$ . Nous réalisons donc dans un premier temps une simulation grâce à laquelle nous déterminons ce terme inconnu. Puis, nous réalisons d'autres simulations pour d'autres valeurs de contrainte appliquée ou d'autres valeurs de sur ou sous-saturation et nous vérifions que le modèle prédit bien la valeur attendue, le terme  $\ln(R_\infty/r_d)$  étant fixé par la première simulation. Pour  $\sigma^A = -500$  MPa et  $c_\infty = c_0$ , nous obtenons une vitesse  $v = 13.8 \times 10^5$  nm/s (voir Annexe D pour la méthode de mesure de cette vitesse). Nous en déduisons ainsi :

$$\ln(R_\infty/r_d) = 2.07 \quad (3.101)$$

Cette valeur est effectivement différente de  $\ln(L/w_d) = \ln(64/6) = 2.37$ , ce qui montre la pertinence de nos choix. Nous fixons ainsi la valeur de  $\ln(R_\infty/r_d)$  à 2.07 pour dresser les courbes théoriques  $v = f(\sigma^A)$  et  $v = f(c_\infty)$ . Nous montrons une comparaison de ces courbes à nos simulations figure 3.10. Nous remarquons ainsi un très bon accord entre analyse asymptotique et simulation. Nous pouvons donc en conclure que notre modèle se comporte correctement. Un léger désaccord est cependant visible figure 3.10b, notamment lorsque les sur-saturations imposées sont élevées. Nous pensons qu'il s'agit là d'un défaut de notre configuration de simulation et de la manière dont est appliquée cette sursaturation. Au lieu d'être effectivement appliquée sur un cercle de rayon  $R_\infty$ , la condition aux limites en concentration en lacunes est appliquée aux bords d'un carré, d'où les différences observées, et ce, d'autant que la sur-saturation est forte ou la sous-saturation faible. Ces désaccords n'apparaissent d'ailleurs pas sur la figure 3.10a, où  $c_\infty = c_0$  et où seule la contrainte appliquée a une influence sur la vitesse de montée. Nous pouvons donc en conclure que notre modèle, avec un jeu de paramètres liés à

l'intégration numérique correctement calibrés, se comporte correctement.

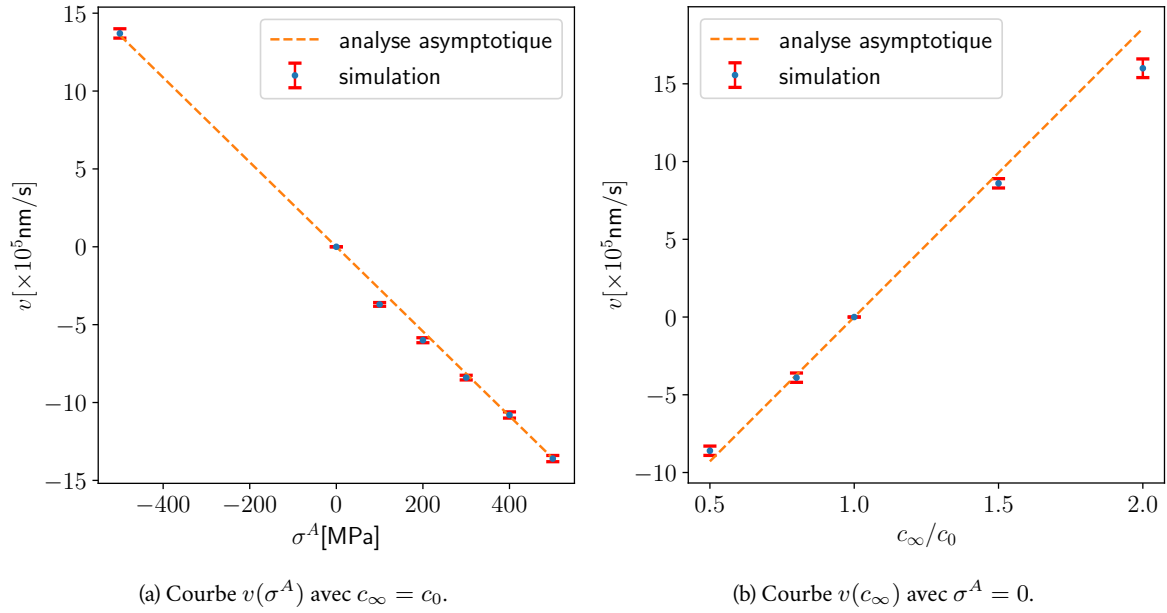


FIGURE 3.10 – Comparaison simulation - théorie. Courbes  $v(\sigma^A)$  et  $v(c_\infty)$ . Les incertitudes de mesure de la vitesse de montée sont représentées par un intervalle de confiance (voir [Annexe F](#) pour la méthode de régression).

Nous souhaitons enfin discuter des résultats obtenus dans le cas simple de montée de dislocations coins. Dans [Geslin \[2013\]](#), l'évolution conjointe de l'ensemble des champs était limitée par le temps caractéristique associé à l'évolution des lacunes  $t_0$ . Nous fixons désormais, grâce à l'introduction de la méthode de point fixe pour la résolution de l'équilibre chimique, un pas de temps de  $\sim 10^2 t_0$  là où  $0.1 t_0$  nous limitait en l'absence de point fixe (voir [section 2.2.2](#)). Dans les simulations que nous avons faites, passées les itérations initiales, selon les situations étudiées, l'algorithme a besoin de 5 à 20 itérations en moyenne pour mettre à jour le champ de concentration en lacunes. Nous avons donc gagné au moins 2 ordres de grandeurs sur les temps de calculs en utilisant judicieusement  $\dot{c} = 0$ . La cinétique de montée n'est pas altérée comme le montre la [figure 3.10](#). En comparaison du cas de la fermeture d'un pore par sous-saturation de lacunes, l'apport du point fixe est ici certes moindre. Il y a d'une part un ordre de grandeur d'écart entre les coefficients cinétiques  $\tilde{L}_\eta$  et  $\tilde{L}_\phi$ , ce qui mène logiquement à un pas de temps d'intégration numérique maximal accessible diminué d'autant. D'autre part, le point fixe est également plus lent à converger dans le cas de la montée, ce qui limite d'autant plus le gain en temps de calculs. Il s'agit néanmoins d'une amélioration majeure qui nous donne accès à des plages de temps simulables beaucoup plus importantes que celles abordées dans [Geslin \[2013\]](#).

### 3.3 Conclusion

Au [chapitre 2](#) nous avons construit un modèle pour simuler des interactions entre pores, lacunes et montées de dislocations. Dans ce chapitre, nous avons cherché à évaluer le comportement de notre mo-

dèle. Nous avons pour cela traité dans un premier temps les interactions pore - lacunes, puis, dans un second temps, la montée de dislocation. Pour chaque cas, nous avons défini une situation qui nous permettait de comparer les prédictions de notre modèle à une formule analytique. Nous en avons conclu que sur ces deux situations, notre modèle se comportait comme attendu. Nous avons montré l'intérêt de traiter l'équation d'évolution du champ de concentration de manière quasi statique et avons ainsi pu gagner jusqu'à 2 ordres de grandeur sur la vitesse d'exécution de notre code. Nous pouvons désormais envisager de traiter des cas plus complexes. Nous voulons notamment exploiter le plein potentiel de notre modèle en traitant les interactions pore, montée de dislocation, lacunes. C'est l'objet du dernier chapitre.

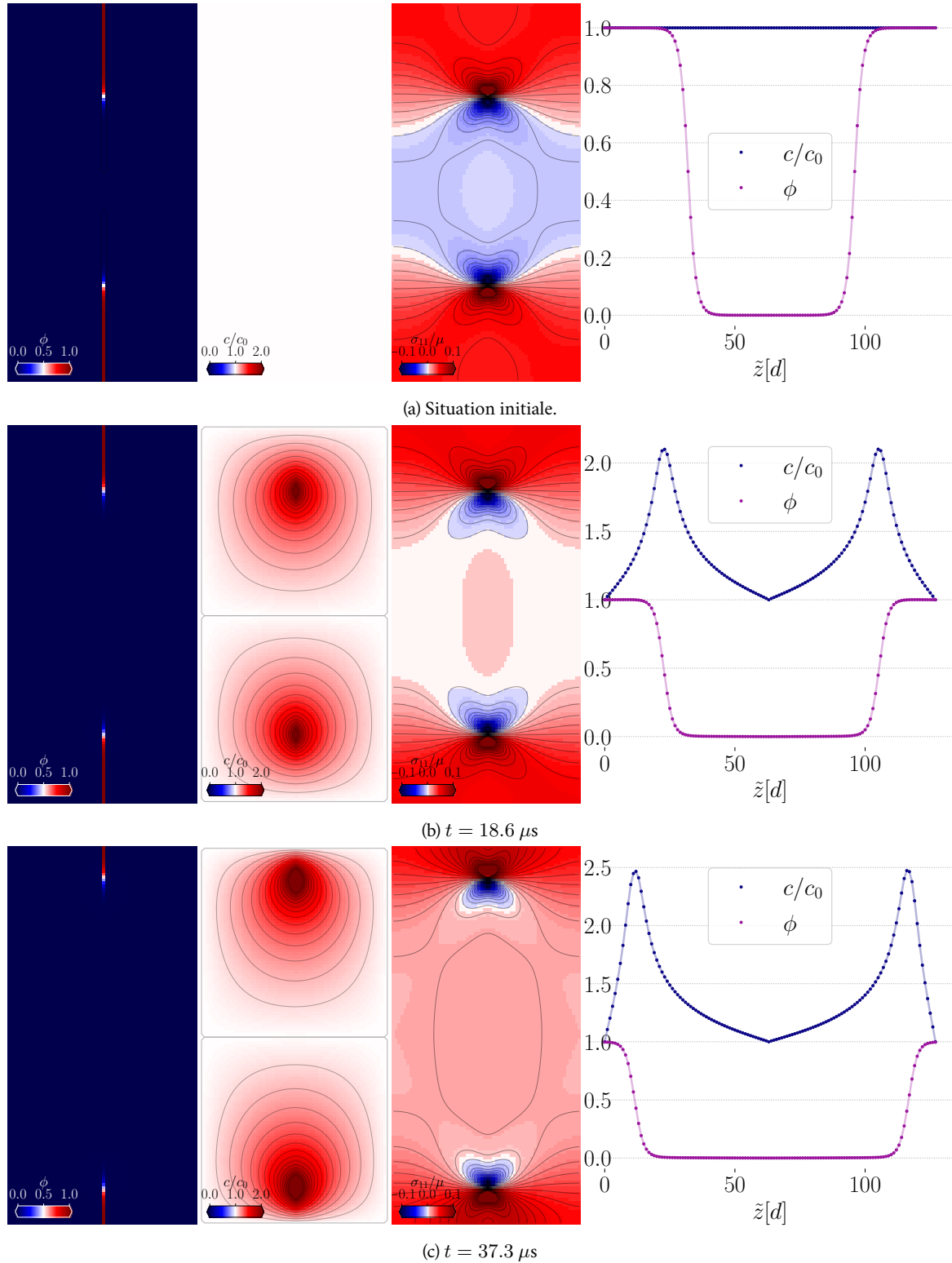


FIGURE 3.9 – Simulation 2D. Montée sous contrainte d’une dislocation coin dans de l’aluminium à 812 K (voir [Annexe B](#)). Nous fixons  $\sigma^A = -500 \text{ MPa}$ ,  $c_\infty = c_0$ ,  $d = b = 0.285 \text{ nm}$  et  $L = 18.2 \text{ nm}$ . De gauche à droite, cartes des champs  $\phi$ ,  $c$ ,  $\sigma_{11}/\mu$  puis tracé des champs  $\phi$  et  $c$  le long de la plaquette de dislocation. Ces cartes sont présentés à 3 instants de la simulation.





## CHAPITRE

# 4

## SIMULATIONS EN CONDITIONS EXPÉRIMENTALES

### Sommaire

---

<b>4.1 Recuit de cavités dans l'Aluminium après irradiation</b> . . . . .	<b>76</b>
4.1.1 Étude de l'interaction de plusieurs cavités entre elles par diffusion de lacunes	77
4.1.2 Étude de l'interaction d'une cavité avec une boucle de dislocation . . . . .	85
4.1.3 Simulations de recuits dans l'aluminium . . . . .	90
4.1.4 Prise en compte d'effets de taille finie . . . . .	102
<b>4.2 Pistes pour l'étude de l'évolution de pores de tailles micrométriques sous contrainte et en présence de dislocations</b> . . . . .	<b>106</b>
<b>4.3 Conclusion</b> . . . . .	<b>107</b>

---

Nous disposons désormais d'un modèle dont nous avons validé le comportement. Dans ce chapitre, nous avons pour objectif d'utiliser ce modèle dans des situations plus réalistes, où les résultats des simulations pourront directement être comparés à des résultats issus d'expériences. Nous avons pour cela identifié deux situations d'intérêt qui s'y prêtent particulièrement bien. La première consiste en l'interaction de cavités et de boucles de dislocation interstitielles dans l'aluminium lors d'un recuit après irradiation [Jacquelin, 2018]. Nous avons décidé de scinder la compréhension du phénomène en trois parties. Nous étudions dans un premier temps la décroissance d'une population de cavités qui interagissent entre elles par diffusion de lacunes et en l'absence de dislocations. Dans un second temps, nous simulons la décroissance d'une cavité en présence d'une boucle de dislocation interstitielle. Enfin, nous simulons la décroissance d'une population de cavités, en présence d'une boucle de dislocation. La deuxième situation d'intérêt concerne l'étude couplée du rôle de la diffusion des lacunes et de la montée des dislocations sur le comblement des pores dans un alliage base-nickel CMSX-4 lors du pressage isostatique à chaud (HIP). Nous nous appuyerons pour cette partie sur les résultats récents obtenus dans [Ruffini *et al.*, 2022] où les interactions entre un pore et des dislocations glissiles ont été étudiées, et où des configurations d'intérêt ont été identifiées qui laissent penser que la montée des dislocations (non prise en compte dans Epishin *et al.* [2018]) est susceptible de jouer un rôle important dans le processus de fermeture du pore.

#### 4.1 Recuit de cavités dans l'Aluminium après irradiation

Nous souhaitons simuler les expériences de Jacquelin [2018] dont quelques clichés sont montrés figure 4.1. Dans ces expériences, un échantillon d'aluminium a été irradié aux électrons à température ambiante puis recuit à 200°C. Les images de recuit montrent des cavités de tailles nanométriques

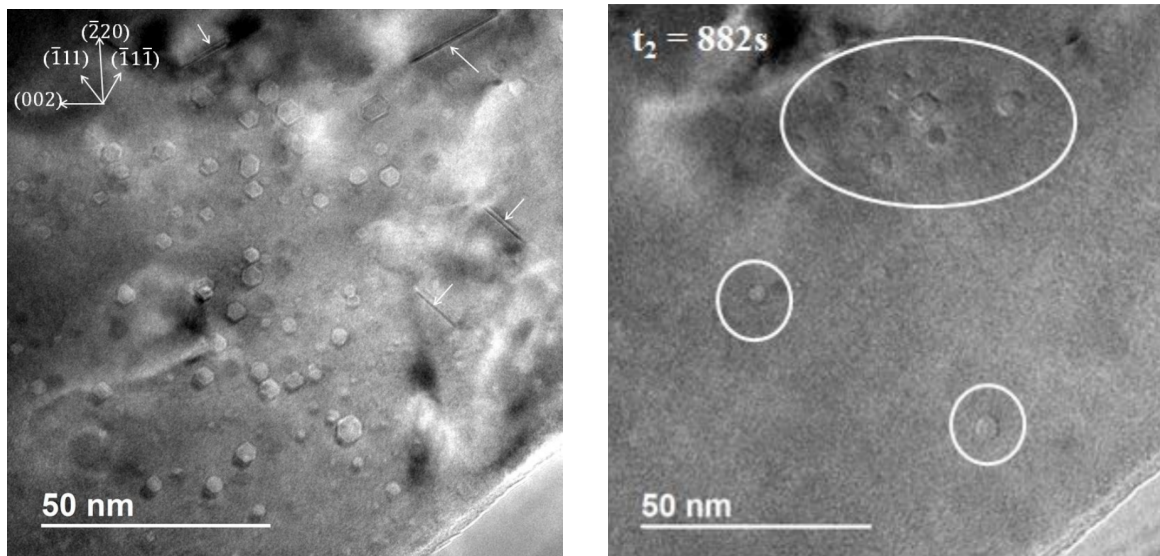


FIGURE 4.1 – Recuit d'un échantillon d'aluminium irradié aux électrons [Jacquelin, 2018]. Clichés MET pris avant (à gauche, température ambiante) et en cours de recuit (à droite,  $t = 882$  s,  $T = 200^\circ\text{C}$ ). Les boucles interstitielles présentes en début de recuit sont indiquées par des flèches blanches. Les cavités encore présentes à 200°C sont entourées en blanc.

qui décroissent à mesure que la température de recuit augmente. Des boucles de dislocation interstitielles sont également présentes et l'objectif est de mieux comprendre l'évolution couplée des cavités et des boucles de dislocations. Nous scindons cette étude en trois parties afin de comprendre au mieux les phénomènes physiques sous-jacents. Nous étudions d'abord l'interaction par diffusion de lacunes de plusieurs cavités entre elles. Puis, nous regardons comment une dislocation interagit avec une cavité. Enfin, nous réalisons des simulations où plusieurs cavités interagissent entre elles, en présence de boucles de dislocation, au plus près des clichés expérimentaux. Pour des raisons d'efficacité numérique, nous réalisons nos simulations à deux dimensions.

#### 4.1.1 Étude de l'interaction de plusieurs cavités entre elles par diffusion de lacunes

Nous nous intéressons à la situation où plusieurs cavités interagissent entre elles par diffusion de lacunes. Cette situation possède, sous certaines hypothèses, une résolution analytique, à laquelle nous souhaitons pouvoir comparer les prédictions de notre modèle. Nous suivons donc dans un premier temps la démarche proposée par [Rovelli \*et al.\* \[2017\]](#) et établissons les dynamiques de décroissance d'une population de cavités, à deux dimensions. Dans un second temps, nous analysons les résultats obtenus par simulations champ de phase à l'aune des comparaisons avec le modèle analytique construit. Nous identifions, par l'observation du champ de concentration, les principaux mécanismes physiques qui gouvernent la décroissance d'une population de cavités.

Nous considérons le système décrit sur la [figure 4.2](#). Des cavités  $\{i\}_{i=1,N}$  de surfaces  $\{\Sigma_i\}_{i=1,N}$  interagissent par diffusion de lacunes dans une matrice de taille finie et caractérisée par une surface extérieure  $S_e$ . Les interactions élastiques ne sont pas considérées. Nous supposons la cinétique d'évo-

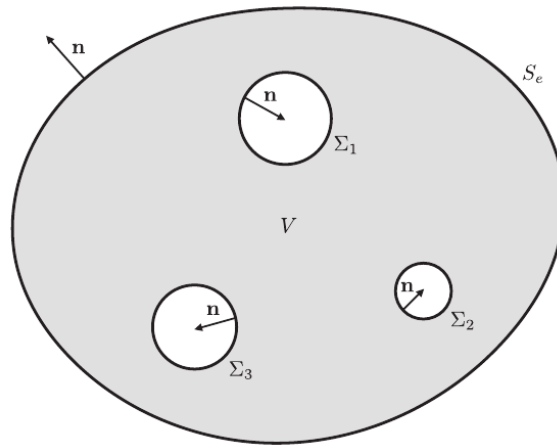


FIGURE 4.2 – Décroissance de plusieurs cavités  $\{i\}_{i=1,N}$  de surfaces  $\{\Sigma_i\}_{i=1,N}$  dans une matrice de surface  $S_e$  [[Rovelli \*et al.\*, 2017](#)]. Les normales aux surfaces, notées  $\mathbf{n}$ , sont représentées.

lution de la concentration en lacunes quasi statique par rapport au mouvement des interfaces. [Rovelli \*et al.\* \[2017\]](#) montre alors que le système est gouverné par l'équation maîtresse suivante,  $\mathbf{x}$  étant le vecteur position :

$$w(\mathbf{x})c(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^N I_{\Sigma_i}(\mathbf{x}) + I_{S_e}(\mathbf{x}), \quad (4.1)$$

où

$$w(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1/2 & \text{si } \mathbf{x} \in S, \\ 1 & \text{si } \mathbf{x} \notin S \text{ et } \mathbf{x} \in V, \\ 0 & \text{si } \mathbf{x} \notin V. \end{cases} \quad (4.2)$$

La surface  $S$  qui intervient dans l'équation (4.2) est la réunion de toutes les surfaces du problème :  $S = \cup_{i=1}^N \Sigma_i \cup S_e$ . Les intégrales  $I_{\Sigma_i}(\mathbf{x})$  et  $I_{S_e}(\mathbf{x})$  sont les expressions de la concentration de lacunes en  $\mathbf{x}$  provenant des surfaces considérées. Nous adoptons la convention de notation selon laquelle  $\partial'_n$  désigne la dérivée d'une quantité suivant le vecteur  $\mathbf{n}$ , normal à la surface (voir figure 4.2). Nous donnons les expressions des intégrales sus-nommées :

$$I_{\Sigma_i}(\mathbf{x}) = \int_{\Sigma_i} dS' [D_v c_{\Sigma_i} \partial'_n G_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}') + v_{\Sigma_i}(\mathbf{x}') G_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}')] \quad (4.3)$$

$$I_{S_e}(\mathbf{x}) = \int_{S_e} dS' [D_v c_{S_e} \partial'_n G_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}') - v_{S_e}(\mathbf{x}') G_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}')] \quad (4.4)$$

La concentration  $c_{\Sigma_i}$  est la concentration d'équilibre à la surface de la  $i$ -ème cavité. Sans hypothèse sur la forme des cavités, elle a pour expression :

$$c_{\Sigma_i} = c_0 \exp\left(\frac{2\Omega\gamma\kappa(\mathbf{x})}{k_B T}\right), \quad (4.5)$$

où  $\kappa(\mathbf{x}) = -1/2\nabla \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x})$  est la courbure moyenne de la surface  $\Sigma_i$  au point  $\mathbf{x}$ . Nous supposons que le champ de concentration  $c$  ne s'éloigne pas trop de la concentration d'équilibre  $c_0$ . Nous linéarisons ainsi l'équation (4.5) autour de  $c_0$  et nous obtenons pour  $c_{\Sigma_i}$  l'expression suivante :

$$c_{\Sigma_i} = c_0 \left(1 + \frac{2\Omega\gamma\kappa(\mathbf{x})}{k_B T}\right) \quad (4.6)$$

La concentration  $c_{S_e}$  est la concentration en lacunes sur la surface  $S_e$ . Les vitesses  $v_{\Sigma_i}(\mathbf{x}')$  et  $v_{S_e}(\mathbf{x}')$  sont les vitesses des interfaces en  $\mathbf{x}'$  avec  $\mathbf{x}' \in \Sigma_i$  et  $\mathbf{x}' \in S_e$  respectivement.  $G_0$  est la fonction de Green associée à l'équation de Fick  $\nabla^2 c = 0$  pour un espace sans cavité. Nous donnons ci-après l'expression de  $G_0$  à 2D :

$$G_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{\ln|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}{2\pi D_v} \quad (4.7)$$

Sans hypothèse supplémentaire, les intégrales des équations (4.3) et (4.4) n'ont pas de solution analytique et ne peuvent qu'être approchées numériquement [Paris *et al.*, 1997; Jiang *et al.*, 2017].

Nous supposons premièrement que les cavités restent sphériques, de rayons  $\{R_i(t)\}_{i=1,N}$  et de centres fixes  $\{\mathbf{x}_i\}_{i=1,N}$ , tout au long de leur décroissance. Nous pouvons ainsi écrire :

$$\forall t, \quad \forall \mathbf{x} \in \{\Sigma_i\}_{i=1,N}, \quad \kappa(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2R_i(t)}, \quad c(\mathbf{x}, t) = c_{\Sigma_i}(t), \quad v_{\Sigma_i}(\mathbf{x}, t) = v_{\Sigma_i}(t) = \frac{dR_i}{dt} \quad (4.8)$$

Nous supposons également que les cavités sont éloignées les unes des autres. Nous pouvons ainsi simplifier l'équation (4.1) pour  $\mathbf{x} \in \{\Sigma_i\}_{i=1,N}$  :

$$\forall \mathbf{x} \in \Sigma_i,$$

$$w(\mathbf{x})c(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^N I_{\Sigma_j}(\mathbf{x}) + I_{S_e}(\mathbf{x}) \quad \text{devient} \quad \frac{c_{\Sigma_i}}{2} = \sum_{j \neq i}^N I_{\Sigma_j}(\mathbf{x}_i) + I_{S_e}(\mathbf{x}_i) + I_{\Sigma_i}(\mathbf{x}) \quad (4.9)$$

Nous paramétrons notre problème 2D de manière à déterminer analytiquement les expressions des termes  $I_{\Sigma_j}(\mathbf{x}_i)$ ,  $I_{S_e}(\mathbf{x}_i)$  et  $I_{\Sigma_i}(\mathbf{x} \in \Sigma_i)$ .

Nous raisonnons sur la  $i$ -ème cavité de notre système. Nous construisons les systèmes de coordonnées polaires suivants, l'origine étant définie au centre  $\mathbf{x}_i$  de la cavité :

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r \cos(\theta) \\ r \sin(\theta) \end{pmatrix} \quad \mathbf{x}' = \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r' \cos(\theta') \\ r' \sin(\theta') \end{pmatrix}$$

Nous procédons en 2 temps, suivant qu' $\mathbf{x}$  est sur la surface de la cavité ou bien loin de cette surface. L'influence de la cavité sur elle-même est appelée  $I_{\Sigma}^{\text{auto}} = I_{\Sigma_i}(\mathbf{x} \in \Sigma_i)$ . L'influence du reste du système est appelée  $I_{\Sigma}^{\text{loin}} = I_{\Sigma_i}(\mathbf{x} \notin \Sigma_i)$ . Nous rappelons qu' $I_{\Sigma}^{\text{auto}}$  et  $I_{\Sigma}^{\text{loin}}$  sont des intégrales sur une sphère de rayon  $r'$  (voir équation (4.3)). Les quantités intégrées ne dépendent ainsi pas de  $\theta$ . Nous donnons ci-après les expressions de  $G_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$  et  $\partial'_n G_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$  évaluées pour  $\theta = 0$  :

$$G_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \Big|_{\theta=0} = \frac{1}{4\pi D_v} \ln \left( r^2 + r'^2 - 2rr' \cos(\theta') \right) \quad (4.10)$$

$$\partial'_n G_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \Big|_{\theta=0} = -\frac{\partial}{\partial r'} G_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \Big|_{\theta=0} = -\frac{1}{4\pi D_v} \left( \frac{r' - r \cos(\theta')}{r^2 + r'^2 - 2rr' \cos(\theta')} \right) \quad (4.11)$$

Pour calculer  $I_{\Sigma}^{\text{auto}}$ , on pose  $r = r' = R_i$  dans l'équation (4.3). On obtient la relation suivante :

$$\begin{aligned} I_{\Sigma}^{\text{auto}} &= \int_0^{2\pi} R_i d\theta' \left[ D_v c_{\Sigma_i} \left( -\frac{1}{2\pi D_v} \frac{R_i(1 - \cos(\theta'))}{2R_i^2(1 - \cos(\theta'))} \right) + \frac{dR_i}{dt} \frac{\ln \left( 2R_i^2(1 - \cos(\theta')) \right)}{4\pi D_v} \right] \\ &= -\frac{c_{\Sigma_i}}{2} + \frac{R_i \ln R_i}{D_v} \frac{dR_i}{dt} \end{aligned} \quad (4.12)$$

Le calcul de  $I_{\Sigma}^{\text{loin}}$  est le suivant :

$$\begin{aligned} I_{\Sigma}^{\text{loin}} &= \frac{R_i}{4\pi D_v} \int_0^{2\pi} d\theta' \left[ 2D_v c_{\Sigma_i} \left( -\frac{R_i - r \cos(\theta')}{r^2 + R_i^2 - 2rR_i \cos(\theta')} \right) + \frac{dR_i}{dt} \ln \left( r^2 + R_i^2 - 2rR_i \cos(\theta') \right) \right] \\ &= \frac{R_i \ln r}{D_v} \frac{dR_i}{dt} \end{aligned} \quad (4.13)$$

Nous résumons les deux points de calculs précédents :

$$I_{\Sigma_i} = \begin{cases} -\frac{c_{\Sigma_i}}{2} + \frac{R_i \ln R_i}{D_v} \frac{dR_i}{dt} & \text{si } \mathbf{x} \in \Sigma_i \\ \frac{R_i \ln r}{D_v} \frac{dR_i}{dt} & \text{si } r > R_i \end{cases} \quad (4.14)$$

Nous retrouvons des résultats similaires à ceux donnés dans [Rovelli et al. \[2017\]](#) pour un système à trois dimensions. Nous effectuons le même travail pour calculer  $I_{S_e}$ . Nous abordons le calcul de cette intégrale en deux temps, en considérant d'abord l'influence de la surface sur elle-même, puis l'influence d'un point loin de la surface sur cette dernière. Nous considérons que notre système évolue dans un cylindre de rayon  $R_{\infty}$  à la surface duquel la concentration est maintenue à  $c_{\infty}$ . Nous donnons ci-après les résultats obtenus :

$$I_{S_e} = \begin{cases} \frac{c_{\infty}}{2} - \frac{R_{\infty} \ln R_{\infty}}{D_v} \frac{dR_{\infty}}{dt} & \text{si } \mathbf{x} \in S_e \\ c_{\infty} - \frac{R_{\infty} \ln R_{\infty}}{D_v} \frac{dR_{\infty}}{dt} & \text{si } \mathbf{x} \notin S_e \end{cases} \quad (4.15)$$

Il nous suffit désormais de substituer les quantités  $I_{\Sigma_j}(\mathbf{x}_i)$ ,  $I_{S_e}(\mathbf{x}_i)$  et  $I_{\Sigma_i}(\mathbf{x} \in \Sigma_i)$  par leurs expressions dans l'équation (4.9). Nous obtenons l'ensemble de  $N + 1$  équations suivant :

$$\left\{ \begin{aligned} \forall i \in \{1, \dots, N\}, \quad D_v(c_{\Sigma_i} - c_\infty) &= \sum_{j=1, j \neq i}^N R_j \ln |\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j| \frac{dR_j}{dt} \\ &\quad + R_i \ln R_i \frac{dR_i}{dt} - R_\infty \ln R_\infty \frac{dR_\infty}{dt} \end{aligned} \right. \quad (4.16)$$

$$\left\{ \begin{aligned} 0 &= \sum_{i=1}^N R_i \frac{dR_i}{dt} - R_\infty \frac{dR_\infty}{dt} \end{aligned} \right. \quad (4.17)$$

où nous rappelons que  $c_{\Sigma_i} = c_0 \left(1 + \frac{\Omega\gamma}{R_i k_B T}\right)$ .

Nous avons suivi la démarche de [Rovelli et al. \[2017\]](#) en l'appliquant à un système 2D cylindrique de rayon  $R_\infty$  au bord duquel est imposée une concentration  $c_\infty$ . Dans cette matrice interagissent par diffusion de lacunes  $N$  cavités circulaires de rayons  $\{R_i\}_{i=1, N}$  et de centres  $\{\mathbf{x}_i\}_{i=1, N}$ . Ces cavités sont considérées comme suffisamment éloignées les unes des autres. Les équations (4.16) et (4.17) gouvernent l'évolution de ce système.

Dans le cas où une cavité de rayon  $R$  et de surface  $\Sigma$  est isolée dans un cylindre de rayon  $R_\infty$  au bord duquel est maintenue une concentration en lacunes  $c_\infty$ , nous vérifions que nous retrouvons la cinétique de décroissance de l'équation (3.39), établie par analyse asymptotique du modèle champ de phase, et à laquelle nous appliquons les hypothèses suivantes :  $c_0 \ll 1$ , effets élastiques négligés et équilibre local. Nous retrouvons ainsi la cinétique de décroissance suivante :

$$\frac{dR}{dt} = \frac{D_v (c_\infty - c_\Sigma)}{R \ln \left(\frac{R_\infty}{R}\right)} \quad (4.18)$$

Nous simulons la fermeture de deux cavités de tailles nanométriques dans du tungstène à 1750 K [[Rovelli et al., 2017](#)]. Les paramètres matériau sont donnés dans l'[Annexe B](#). Nous montrons [figure 4.3](#) l'évolution du rayon des deux cavités de rayons initiaux 3.5 et 3 nm respectivement en comparaison des prédictions faites à partir des équations (4.16) et (4.17). Pour les deux cavités, c'est la dissipation de l'énergie de surface par diffusion de lacunes qui prédomine. Par conséquent, les deux cavités se referment. Nous constatons un très bon accord entre les résultats issus de l'intégration numériques des équations formelles et ceux issus de la simulation pour la cavité 1, la plus petite des deux et la première à se fermer. La fermeture de la cavité 2 s'écarte quant à elle de la théorie aux alentours de  $t = 1\text{h}$ . Pour mieux comprendre les raisons de cet écart, nous donnons [figure 4.4](#) des cartes du champ de concentration  $c/c_0$  à différents instants croissants de la simulation. Les courbes d'iso-concentration nous aident à évaluer si le champ  $c$  respecte l'hypothèse de symétrie sphérique dans laquelle nous nous sommes placés pour établir une formule analytique. Nous pouvons ainsi constater qu'à partir d'un temps simulé d'1h, nous ne sommes plus dans cette hypothèse. La dissymétrie du champ  $c$  est particulièrement visible à  $t = 2\text{h}$  pour la cavité située à droite. C'est ce qui explique les différences entre prédiction théorique et simulation.

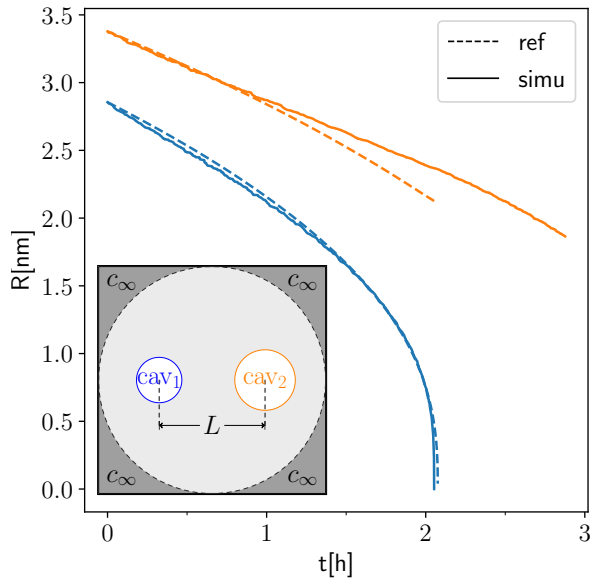


FIGURE 4.3 – Simulation 2D ( $1024 \times 1024$ ). Fermeture de deux cavités dans du tungstène à 1750K. La configuration de simulation est schématiquement représentée dans le coin inférieur gauche. Nous fixons les paramètres numériques suivants :  $d = 0.1$  nm,  $c_\infty = c_0$ ,  $R_\infty = 51.2$  nm,  $L = 30$  nm. La courbe en pointillé montre la prédiction analytique des équations (4.16) et (4.17) tandis que la courbe en trait plein montre les résultats de la simulation. Durée de simulation sur 4 cœurs : 16.8 h.

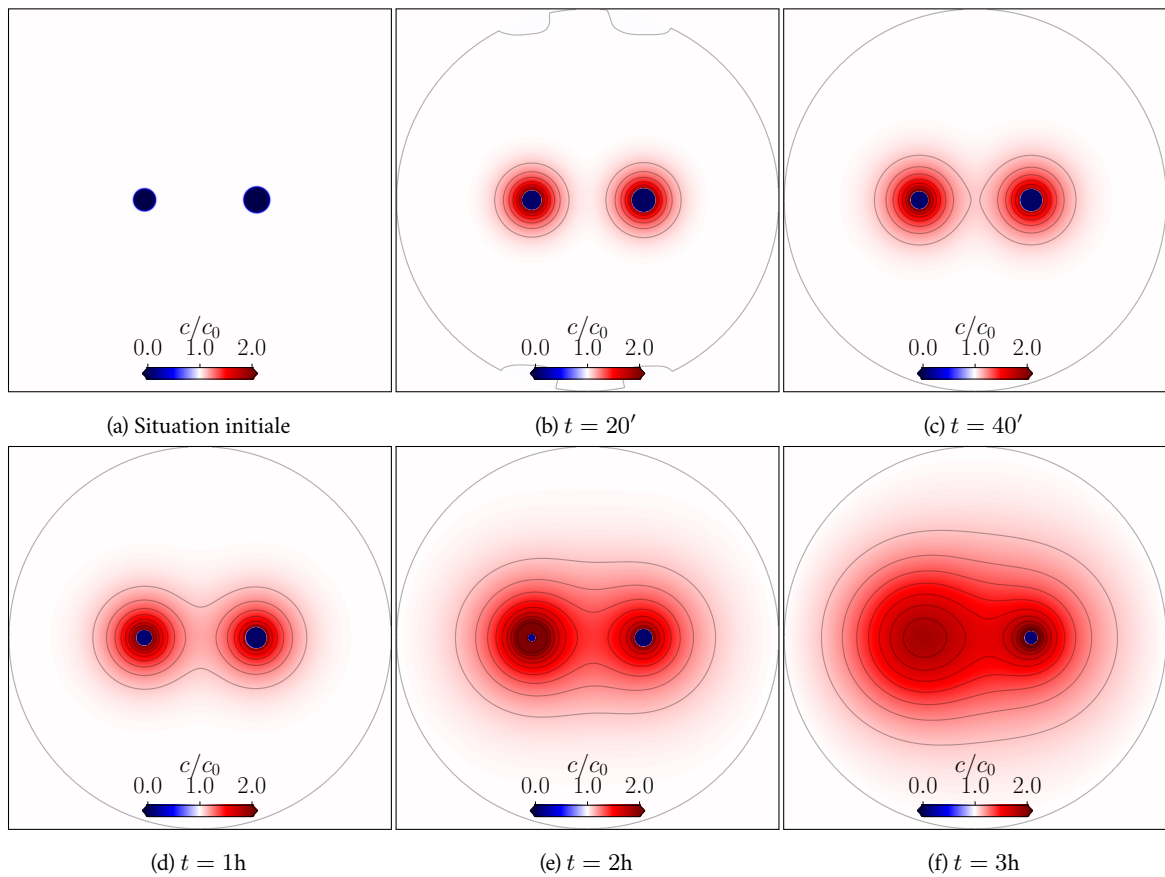


FIGURE 4.4 – Cartes du champ  $c/c_0$  avec lignes de niveau au cours du temps.



Nous réalisons deux simulations complémentaires dans lesquelles chacune des deux cavités est placée seule dans la matrice. Nous pouvons ainsi comparer [figure 4.5](#) l'évolution des rayons des deux cavités dans le cas où elles interagissent entre elles et dans le cas où elles sont seules. Nous observons que le rayon des cavités décroît plus lentement lorsque les deux cavités interagissent entre elles. Cette observation vient confirmer le résultat avancé par [Rovelli \*et al.\* \[2017\]](#). Cet article montre également que lorsque les cavités sont suffisamment proches, la fermeture de la plus petite est accélérée et non plus ralentie. L'observation des profils de concentration dans ces deux cas nous permet d'expliquer ces observations.

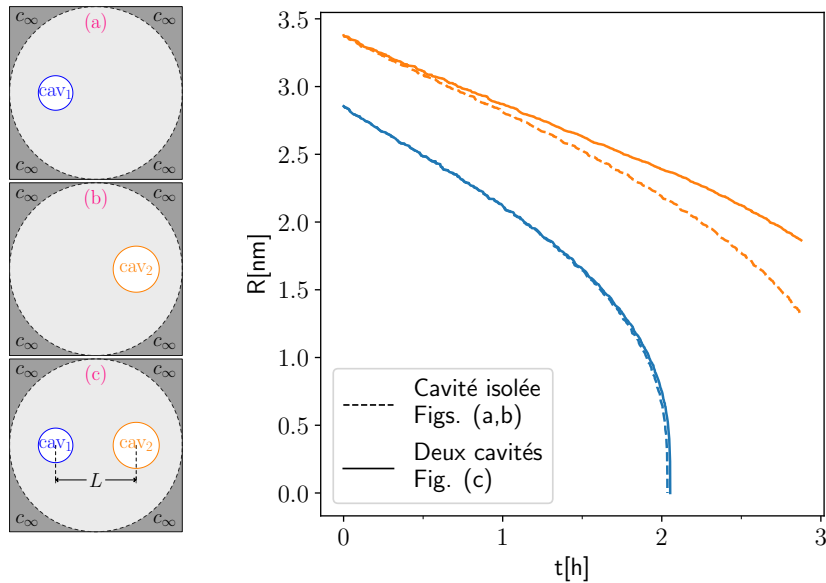


FIGURE 4.5 – Comparaison de la dynamique de fermeture des cavités dans les deux situations suivantes : 1. Les cavités 1 et 2 sont tour à tour considérées seules dans la matrice (schémas de gauche, haut et milieu). Il s'agit des courbes  $R(t)$  en pointillé. 2. Les deux cavités interagissent entre elles (voir [figures 4.3](#) et [4.4](#)). Les courbes  $R(t)$  issues de cette simulations sont en trait plein.

La [figure 4.6](#) montre les profils des champs  $c$  et  $\eta$  en cours de simulation pour deux simulations. Dans la première ([figure 4.6a](#)), la distance qui sépare les deux cavités est de 30 nm, soit environ 10 fois la taille de ces cavités. À la surface des deux cavités, la concentration est fixée par l'effet Gibbs-Thomson. Du point de vue de la cavité de gauche, la queue du profil de concentration émanant de la cavité de droite vient légèrement rehausser la concentration entre les deux cavités. Le gradient de concentration à la surface de cette cavité, qui fixe à un facteur multiplicatif près la valeur de la vitesse de fermeture, est donc légèrement abaissé entre les deux cavités. La cavité de gauche décroît ainsi plus lentement que si elle avait été seule.

Dans la seconde situation, présentée [figure 4.6b](#), les deux cavités sont si proches l'une de l'autre –  $L = 10\text{nm}$  de l'ordre de la taille des cavités – que le gradient de concentration est principalement défini par la différence des concentrations aux abords immédiats des interfaces, fixées par les courbures respectives des cavités, et la distance qui les sépare. Plus la distance est petite, plus ce gradient devient important. On voit également bien sur la [figure 4.6b](#) que le gradient de concentration en lacunes entre les deux cavités est tel qu'un flux de lacunes très important vers la grosse cavité apparaît.

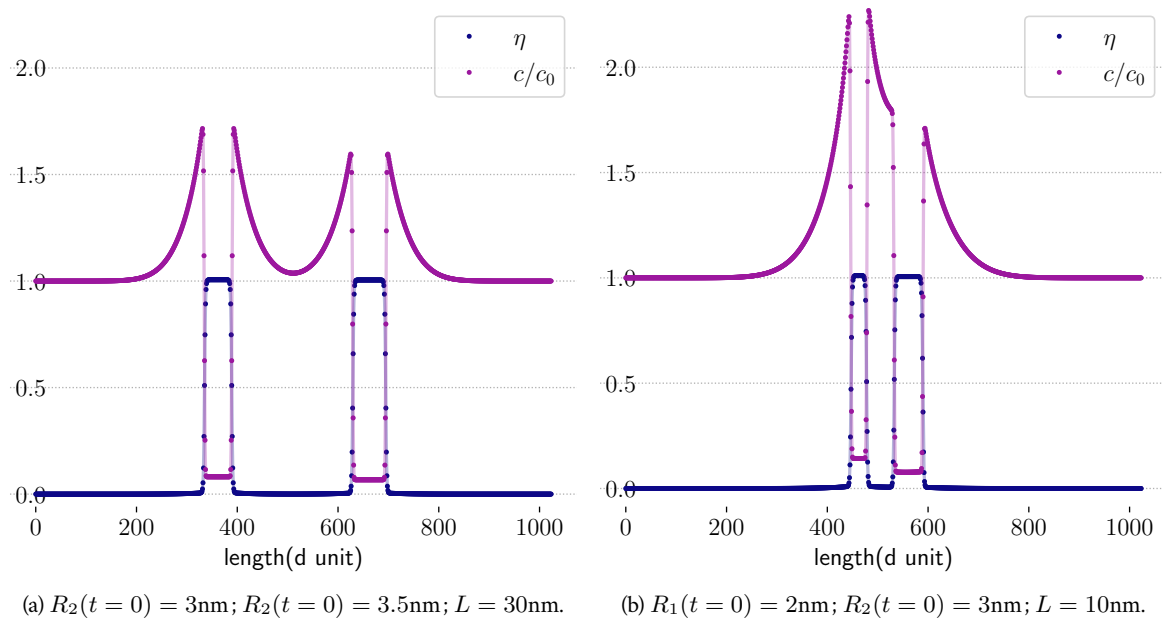


FIGURE 4.6 – Profils  $c/c_0$  et  $\eta$  à  $t = 20'$  le long d'une ligne passant par le centre des deux cavités. Le graphe (a) correspond à deux cavités éloignées. Le graphe (b) correspond à deux cavités proches. Les caractéristiques géométriques de chaque simulation sont décrites en dessous de chaque graphe.

Ce phénomène, qui alimente la cavité 2 en lacunes, va finalement ralentir sa fermeture.

Le raisonnement que nous venons de faire permet également de comprendre l'évolution du rayon de

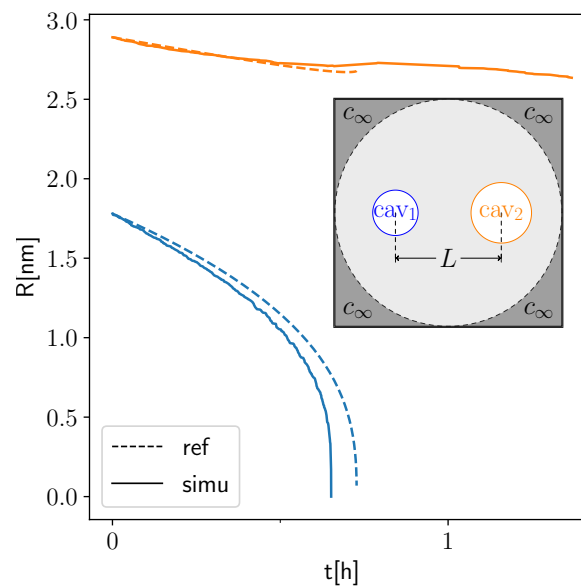


FIGURE 4.7 – Simulation 2D ( $102.4\text{nm} \times 102.4\text{nm}$ ) de la fermeture de deux cavités dans du tungstène à 1750K.  $d = 0.1\text{ nm}$ ,  $c_\infty = c_0$ ,  $R_\infty = 51.2\text{ nm}$ ,  $L = 10\text{ nm}$ . Les courbes en pointillé montrent la prédiction analytique des équations (4.16) et (4.17) tandis que les courbes en trait plein montrent les résultats de la simulation. Durée de simulation sur 4 cœurs : 9.3 h.

la grosse cavité quand la petite cavité est sur le point de disparaître. Comme on peut le voir sur la [figure 4.7](#), le rayon de la grosse cavité (cavité 2) cesse momentanément de décroître vers  $t = 0.7\text{h}$ . Ce

comportement s'explique par un effet Gibbs-Thomson très important pour la petite particule ce qui implique un gradient de concentration important entre les particules et donc un flux de lacunes vers la grosse particule qui est suffisant pour momentanément stopper sa décroissance.

Notons que dans l'hypothèse où  $R_\infty$  est grand, on retrouve ici les mécanismes expliquant le mûrissement d'Ostwald.

Nous pouvons également élargir à  $N$  cavités les conclusions émises dans le cadre de l'interaction de deux cavités par observation des profils issus de nos simulations en exploitant les équations (4.16) et (4.17). En substituant l'équation (4.17) dans l'équation (4.16), nous obtenons la relation suivante :

$$\frac{dR_i}{dt} = \frac{1}{R_i \ln\left(\frac{R_i}{R_\infty}\right)} \left[ D_v (c_{\Sigma_i} - c_\infty) - \sum_{j=1, j \neq i}^N R_j \ln\left(\frac{L_{ij}}{R_\infty}\right) \frac{dR_j}{dt} \right] \quad (4.19)$$

où nous avons introduit  $L_{ij} = |\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|$ . Nous pouvons ainsi confirmer qu'il existe des situations pour lesquelles la cavité  $i$  croît. Ce sont les cas où :

$$D_v (c_{\Sigma_i} - c_\infty) < \sum_{j=1, j \neq i}^N R_j \ln\left(\frac{L_{ij}}{R_\infty}\right) \frac{dR_j}{dt} \quad (4.20)$$

L'équation (4.19) permet également de comprendre le comportement des cavités dans les situations où l'ensemble des cavités sont en décroissance. En notant que les vitesses de fermeture sont données par  $v_i = -dR_i/dt$  et en notant  $v_i^0$  la vitesse de fermeture de la cavité  $i$  en l'absence d'autres cavités (voir équation (4.18)), l'équation (4.19) devient :

$$v_i = v_i^0 - \sum_{j=1, j \neq i}^N \frac{R_j \ln\left(\frac{L_{ij}}{R_\infty}\right)}{R_i \ln\left(\frac{R_i}{R_\infty}\right)} v_j \quad (4.21)$$

Il apparaît ainsi clairement que plus il y a de cavités à proximité de la cavité  $i$ , plus celle-ci est ralentie dans sa fermeture. Plus la distance entre les cavités est faible, plus ce ralentissement est fort. Ou son corollaire : plus les cavités sont éloignées, plus la vitesse de fermeture de la cavité  $i$  se rapprochera de celle qu'elle aurait eue si elle avait été seule dans la matrice.  $v_i^0$  est une asymptote pour  $v_i$ .  $v_i$  sera cependant toujours inférieure à  $v_i^0$  quels que soient l'éloignement et le nombre de cavités  $j$  présentes.

## Conclusion

À l'aide d'un modèle 2D construit en suivant la démarche proposée Rovelli *et al.* [2017] et en exploitant les profils des champs de concentrations issus de nos simulations, nous avons mis en évidence les phénomènes physiques à l'œuvre lorsque plusieurs cavités interagissent entre elles par diffusion de lacunes et en l'absence d'élasticité. L'utilisation du champ de phase nous a permis d'aller au delà des hypothèses de l'analyse formelle et nous a ainsi permis d'étudier des symétries non sphériques.

### 4.1.2 Étude de l'interaction d'une cavité avec une boucle de dislocation

Nous souhaitons désormais étudier les interactions entre une cavité et une boucle de dislocation interstitielle. Nous cherchons plus particulièrement à comprendre l'impact de la présence d'une boucle de dislocation interstitielle à proximité d'une cavité et *vice-versa*. Nous construisons la situation bi-dimensionnelle schématiquement représentée [figure 4.8](#), dans laquelle une cavité interagit avec une boucle de dislocation interstitielle. Cette boucle interstitielle est définie dans le cadre de notre modèle en affectant la valeur 1 au champ  $\phi$  pour l'ensemble des points situés dans le plan de la boucle (zones blanches dans le plan de montée sur la [figure 4.8](#)), sauf pour les points à l'intérieur de la boucle où le champ  $\phi$  est mis à 0 (zone grise entre les deux zones blanches dans le plan de montée sur la [figure 4.8](#)). La boucle de dislocation interstitielle correspond ainsi à la zone grise, de la même couleur que la matrice, située entre les deux dislocations coins. Nous contrôlons la position relative des deux objets au travers les paramètres notés  $\Delta_x$  et  $\Delta_y$ , définis dans la [figure 4.8](#). Nous appelons  $R_p$  et  $R_d$  les rayons respectifs de la cavité et de la boucle de dislocation.

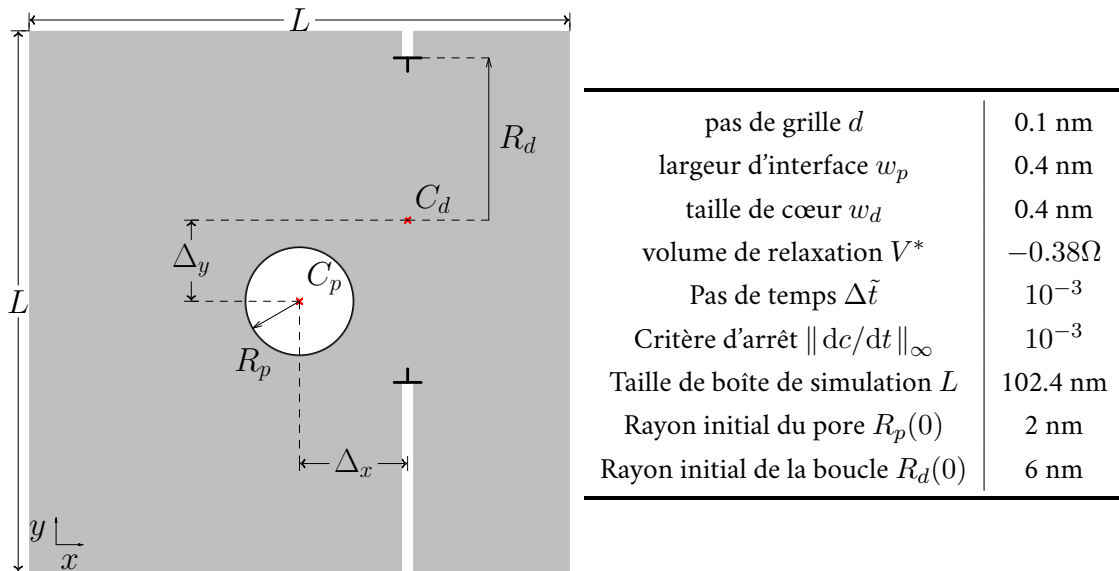


FIGURE 4.8 – Schéma de la situation initiale des simulations effectuées dans le cadre de l'étude des interactions entre une cavité et une boucle de dislocation interstitielle. Le domaine simulé est un carré (2D) de côté  $L$ . Les zones blanches de part et d'autre du dipôle de dislocations coins correspondent aux régions où  $\phi = 1$ . Les points  $C_p$  et  $C_d$  représentent le centre de la cavité et de la boucle de dislocation respectivement. Nous définissons la position relative de la boucle et de la cavité par deux quantités,  $\Delta_x = \overrightarrow{C_p C_d} \cdot \vec{x}$  et  $\Delta_y = \overrightarrow{C_p C_d} \cdot \vec{y}$ . Nous appliquons des conditions aux limites périodiques. Nous n'imposons aucune concentration au bord ni n'appliquons aucune contrainte. La concentration en lacunes dans la matrice est  $c_0(T)$  en début de simulation.

Nous réalisons un ensemble de simulations dans lesquelles un dipôle de dislocations de rayon (demi-distance entre les deux dislocations coins) initial  $R_d(t = 0) = 6$  nm interagit avec une cavité de rayon initial  $R_p(t = 0) = 2$  nm. En fixant la taille de notre boîte de simulation à 102.4 nm, soit 10 fois la taille du plus grand objet présent, nous nous assurons que le système simulé reproduit bien le comportement d'une cavité et d'une boucle de dislocations isolées. Pour des raisons d'efficacité numérique, nous fixons le pas de temps  $\Delta\tilde{t}$  à  $10^{-3}$ . Nous sommes conscients qu'il s'agit là d'un pas de

temps plus de 10 fois supérieur à la valeur maximale admissible pour reproduire quantitativement les cinétiques de fermetures des objets attendues (voir notre étude préliminaire à la montée de dislocation [chapitre 3](#) et [Annexe E](#)). Nous justifions notre choix en considérant d'une part les coûts de calculs à envisager et en réalisant d'autre part une série de 4 simulations sur un système plus petit ( $L = 51.2$  nm) et pour 4 configurations particulières, afin de nous assurer que nous observons bien les mêmes phénomènes physiques, indépendamment du pas de temps choisi. Nous détaillons tout d'abord les coûts de calcul associés aux simulations que nous projetons de réaliser. Le choix d'un pas de temps de  $10^{-3}$  pour une simulation  $102.4$  nm  $\times$   $102.4$  nm coûte 2 jours de simulation avec une parallélisation OpenMP sur 4 nœuds et l'usage de bibliothèques FFTW optimisées<sup>1</sup>.  $\Delta\tilde{t} = 10^{-4}$  mène à 20 jours de calculs.  $\Delta\tilde{t} = 5 \cdot 10^{-5}$ , le pas de temps maximal admissible selon nos études préliminaires à la montée, nécessite 40 jours de simulation. Ceci pour un seul point  $(\Delta_x, \Delta_y)$ . Même en réduisant le nombre de points que nous projetons de simuler, nous atteignons des temps de calcul totaux qui se comptent en années de simulation, ce qui n'est pas envisageable. Considérons maintenant le point de vue physique. Nous montrons [figure 4.9](#) l'évolution des rayons des objets considérés dans les différentes situations simulées, pour les pas de temps  $10^{-3}$  et  $10^{-4}$ . Ces courbes confirment les analyses précédemment menées

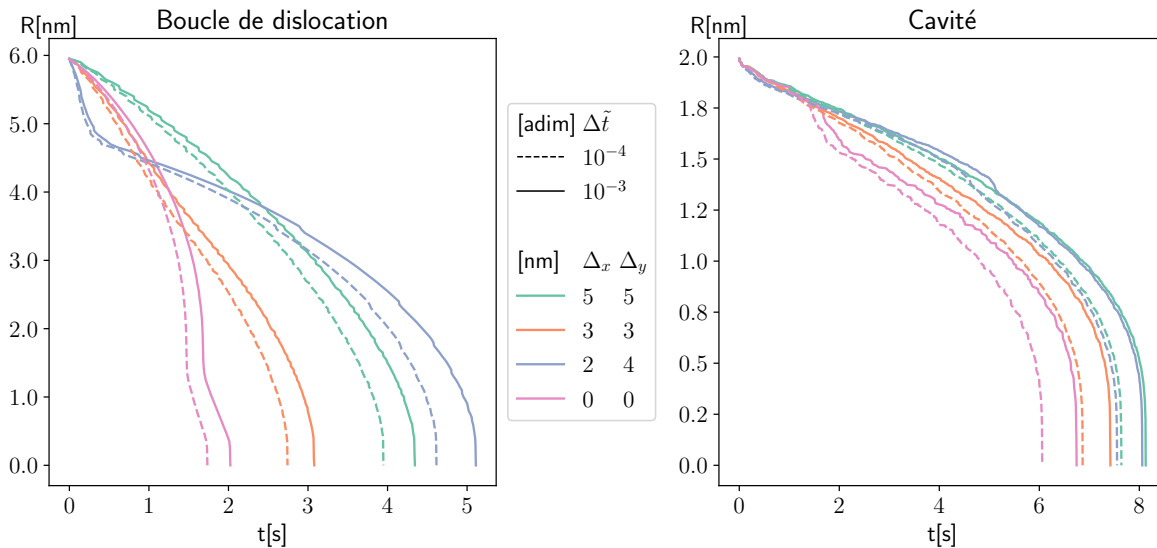
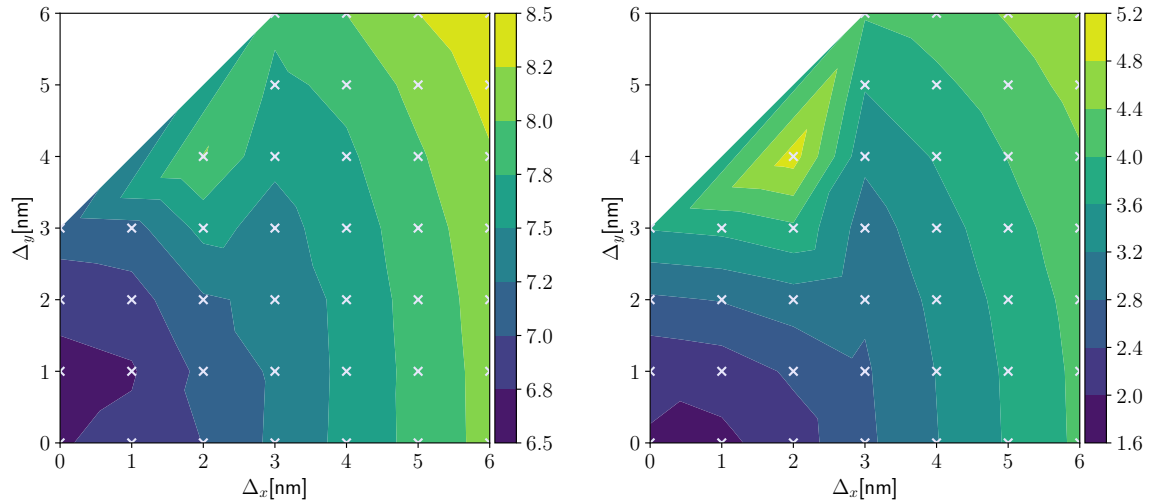


FIGURE 4.9 – Simulations 2D. Interactions entre une cavité et une boucle de dislocation interstitielle.  $L = 51.2$  nm. Courbes  $R(t)$  pour la boucle et le pore. Deux pas de temps sont comparés  $\Delta\tilde{t} = \{10^{-4}, 10^{-3}\}$ . Les points de simulation  $(\Delta_x, \Delta_y)$  simulés sont les suivants :  $(0, 0)$ ,  $(2, 4)$ ,  $(3, 3)$  et  $(5, 5)$ . Ces calculs, avec une parallélisation OpenMP (mémoire partagée) sur 4 nœuds et l'utilisation de bibliothèques FFTW optimisées, durent de 2.5j  $(0, 0)$  à 6.5j  $(2, 4)$  avec  $\Delta\tilde{t} = 10^{-4}$  et de 9h à 16h lorsque  $\Delta\tilde{t} = 10^{-3}$ .

concernant le pas de temps maximal admissible (voir [Annexes D](#) et [E](#)). Augmenter le pas de temps ralentit la cinétique de fermeture des objets considérés. L'allure générale des courbes n'est cependant pas modifiée. Nous en concluons que le choix d'un pas de temps plus grand ne change pas les phénomènes physiques moteurs des fermetures que nous étudions. Nous justifions ainsi notre choix  $\Delta\tilde{t} = 10^{-3}$ .

1. 60% du temps de calcul est passé dans les routines FFTW et la parallélisation au-delà de 4 nœuds n'entraîne pas de gain substantiel.

Nous montrons [figure 4.10](#) comment varie le temps de fermeture de chacun des objets en présence en fonction de leur position l'un par rapport à l'autre. Assez logiquement, plus les deux objets sont



(a) Temps de fermeture de la cavité [s] en fonction de la position du dipôle de dislocation.

(b) Temps de fermeture de la boucle de dislocation [s] en fonction de sa position par rapport à la cavité.

FIGURE 4.10 – Temps de fermeture de la cavité et du dipôle de dislocation en fonction de la position relative de l'un par rapport à l'autre.  $R_p(t=0) = 2$  nm et  $R_d(t=0) = 6$  nm. Les points de simulation sont marqués d'une croix blanche. Pour référence, lorsque ces objets sont isolés, les temps de fermeture obtenus par simulation sont les suivants :  $t_f^p = 9.0$  s pour la cavité et  $t_f^d = 10.6$  s pour la boucle de dislocation.

éloignés l'un de l'autre, plus la cavité se ferme lentement tout comme le dipôle de dislocations. Le point  $(\Delta_x, \Delta_y) = (2, 4)$  nm attire cependant notre attention puisqu'il s'agit d'un maximum local du point de vue du temps de fermeture des deux objets. Pour comprendre les phénomènes physiques en jeu, nous commentons [figures 4.11](#) et [4.12](#) les cartes de concentrations et les cartes de contraintes des points  $(2, 4)$ ,  $(3, 3)$ ,  $(6, 6)$  et  $(0, 0)$ .

De point de vue de la diffusion (voir [figure 4.11](#)), le dipôle de dislocations crée deux puits de lacunes au niveau des cœurs des deux dislocations coins. L'effet Gibbs Thomson, associé à la présence d'interfaces courbes, crée une sursaturation de lacunes autour de la cavité, d'où un gradient de concentration entre la cavité et la boucle d'autant plus fort que les objets sont proches, d'où l'accélération des fermetures. Ces effets diffusifs sont également présents à trois dimensions et leur description dans le cadre tridimensionnel d'une solution diluée est donnée dans [Rovelli et al. \[2017\]](#).

Du point de vue élastique (voir [figure 4.12](#)), les contraintes générées à proximité du cœur des dislocations sont très importantes. Dans la théorie élastique des dislocations [[Hirth et al., 1983](#)], le point associé au cœur des dislocations présente une singularité où les contraintes divergent. Dans les simulations champ de phase, les cœurs sont diffus et possèdent dans le cas présent des tailles réalistes de l'ordre de quelques Angströms (quelques points de grille). En supposant que l'élasticité linéaire est encore valide au niveau des cœurs, nous pouvons considérer que les champs de contraintes simulés ont des amplitudes réalistes qui sont localement de l'ordre de grandeur du module de cisaillement (voir [fi-](#)

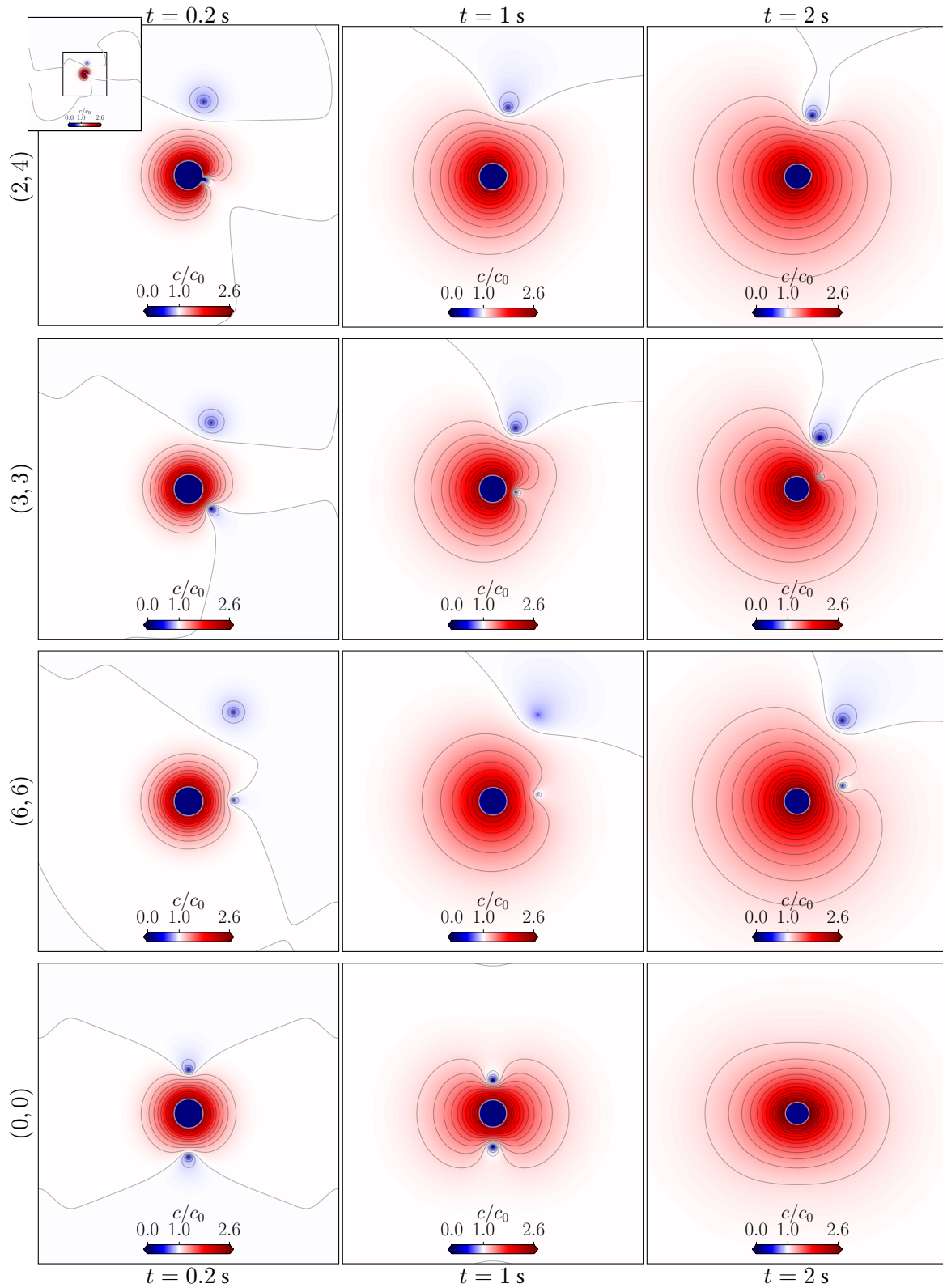


FIGURE 4.11 – Cartes du champ  $c/c_0$  obtenues lors de l'interaction d'une boucle de dislocation interstitielle avec une cavité. La boîte de simulation totale est présentée en encart (coin supérieur gauche). Les cartes représentent l'évolution temporelle de la zone centrale de la boîte de simulation ( $t = 0.2, 1, 2$  s) pour 4 positions relatives entre la cavité et la boucle de dislocation (couples  $(\Delta_x, \Delta_y) = (2, 4), (3, 3), (6, 6), (0, 0)$ ).



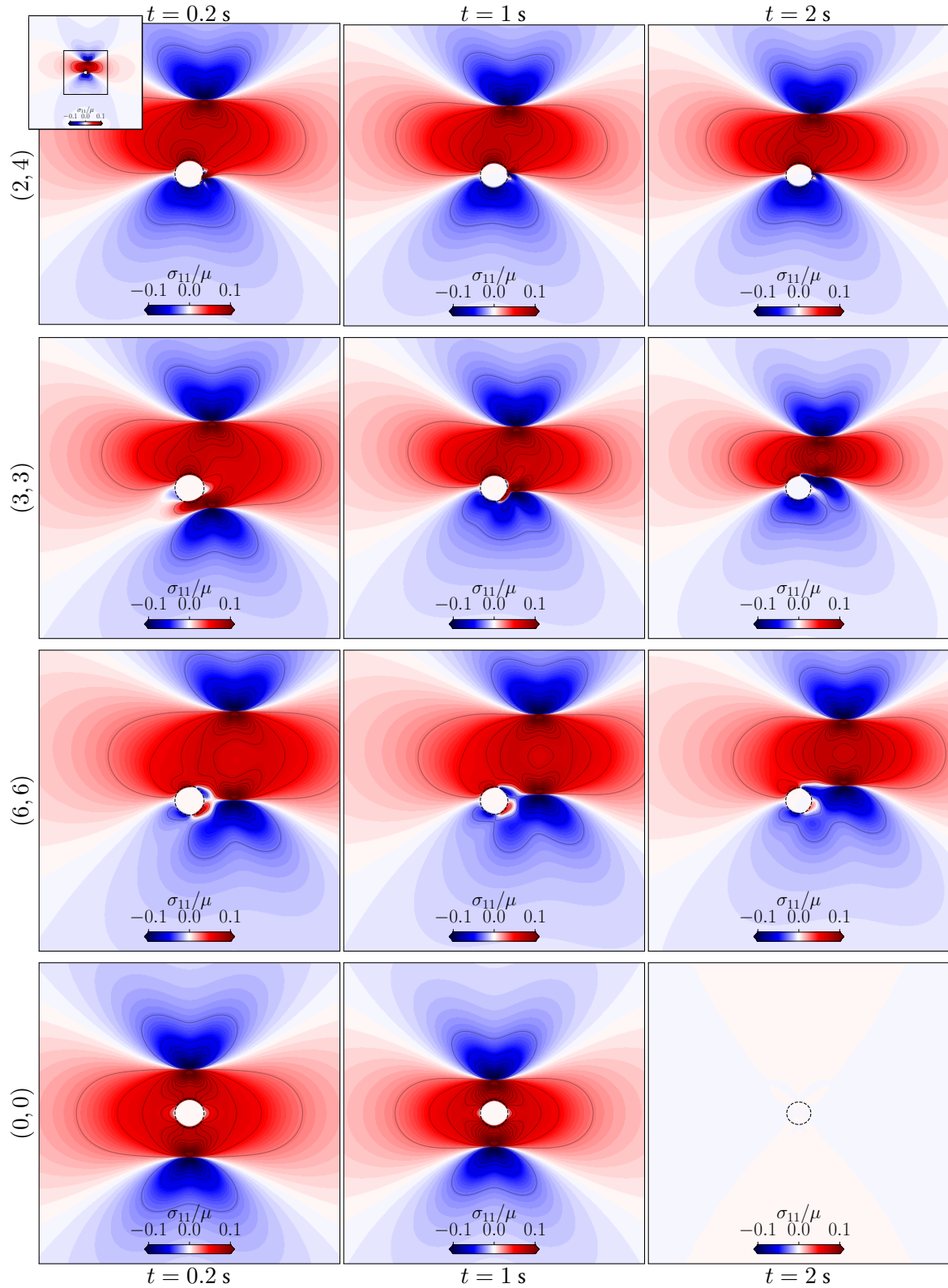


FIGURE 4.12 – Cartes du champ de contrainte  $\sigma_{11}/C_{44}$ , obtenues lors de l'interaction d'une boucle de dislocation interstitielle avec une cavité. La boîte de simulation totale est présentée en encart (coin supérieur gauche). Les cartes représentent l'évolution temporelle de la zone centrale de la boîte de simulation ( $t = 0.2, 1, 2$  s) pour 4 positions relatives entre la cavité et la boucle de dislocation (couples  $(\Delta_x, \Delta_y) = (2, 4), (3, 3), (6, 6), (0, 0)$ ).



gure 4.12). Pour les points (0, 0) et (2, 4), nous constatons ainsi que, sous l'effet des contraintes élevées générées au niveau des cœurs, la cavité est déformée et n'est plus circulaire. Concernant le point (2, 4), le plan de montée des dislocations coin est tangent à l'interface de la cavité. Nous rappelons que les coefficients élastiques à l'intérieur de la cavité sont nuls. Par conséquent, lorsque le cœur situé en bas arrive dans l'interface de la cavité, la force motrice élastique participant à la fermeture du dipôle devient nulle. Il ne reste qu'une force motrice chimique. Nous pouvons voir figure 4.11 que sursaturation lié à la présence de l'interface courbe de la cavité et sous-saturation associée à la présence de la dislocation coin se compensent. La force osmotique associée est ainsi nulle. Cette dislocation ne travaille plus. Ainsi, il n'y a plus qu'une seule dislocation pour absorber les lacunes émises par la cavité. Cavité et dipôle se ferment plus lentement. Nous voyons clairement cet effet d'attache en observant l'évolution de l'énergie élastique au cours de la simulation figure 4.13. Pour le point (2, 4), l'énergie élastique décroît rapidement au début puis très lentement à partir du moment où le cœur situé en bas est « accroché » à la cavité. Le même phénomène, de moindre importance, explique la variation de l'énergie élastique pour le point (3, 3).

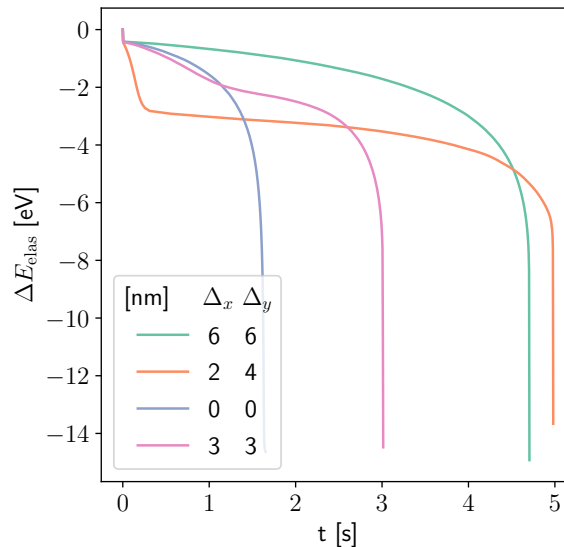


FIGURE 4.13 – Variation de l'énergie élastique au cours du temps pour les points (0, 0), (2, 4), (3, 3) et (6, 6).

Cette série de simulations montre à quel point les effets élastiques sont importants dans le cadre des interactions entre dislocations et cavités. Nous montrons ainsi l'intérêt de disposer d'un modèle numérique complet qui permet d'observer des phénomènes non pris en compte dans des approches antérieures comme par exemple celle de [Rovelli \*et al.\* \[2017\]](#).

### 4.1.3 Simulations de recuits dans l'aluminium

Nous souhaitons désormais appliquer notre modèle à la situation expérimentale issue des travaux de [Jacquelin \[2018\]](#) et décrite figure 4.1. Ces images sont issues d'une série de recuits après irradiation, alternant successivement isothermes et isochrones. Les observations décrites dans le manuscrit de thèse de Camille Jacquelin sont faites sur des lames FIB d'épaisseur 100nm. Les observations sont ef-

fectuées sous faible flux d'électrons de manière à minimiser le nombre de défauts créés, qui pourraient avoir une influence sur la microstructure. Nous négligeons donc cet aspect dans nos simulations pour ne considérer que l'effet de la température. Les phases de recuits isothermes à température ambiante ou à 100°C n'engendrent pas de modifications significatives de la microstructure. Nous choisissons de nous concentrer sur la phase de recuit isotherme à 200°C au cours de laquelle la plupart des objets disparaissent. Nous faisons également le choix de placer initialement la matrice à l'équilibre thermodynamique, en étant conscient que les lacunes sont en réalité globalement en légère sous-saturation du fait des recuits à plus basse température qui précèdent celui à 200°C. La microstructure étudiée comporte des cavités facettées dont les rayons sont compris entre 1.85 et 2.84 nm. Nous ne reproduirons pas les facettes mais nous nous appliquerons à conserver l'ordre de grandeur des tailles des cavités. Nous voyons également sur les clichés des boucles de dislocations interstitielles, dont la taille est 2 à 3 fois celle des cavités. Les densités de cavités évoquées varient de  $2.90 \cdot 10^{22}/\text{m}^3$  à  $15.08 \cdot 10^{22}/\text{m}^3$ .

D'un point de vue numérique, pour les raisons de performances numériques déjà commentées en début de chapitre, nous décidons de simuler un système 2D, de 102.4nm par 102.4nm. Dans un premier temps, nous appliquons aux bords des conditions aux limites périodiques. À deux dimensions, les densités de cavités à considérer varient entre  $9.44 \cdot 10^{-4}/\text{nm}^2$  et  $2.83 \cdot 10^{-3}/\text{nm}^2$ . Pour un système de 102.4nm par 102.4nm, le nombre de cavités à simuler varie donc de 10 à 30 cavités<sup>2</sup>. Nous rappelons ces correspondances dans le [tableau 4.1](#). En accord avec cet intervalle de valeurs, nous choisissons de

$\rho_{3D}$ [ $\text{nm}^3$ ]	$\rho_{2D}$ [ $\text{nm}^2$ ]	$n$
$2.90 \cdot 10^{-5}$	$9.44 \cdot 10^{-4}$	10
$15.08 \cdot 10^{-5}$	$2.83 \cdot 10^{-3}$	30

TABLEAU 4.1 – Densités de cavités observées dans [Jacquelin \[2018\]](#). Densités équivalentes à 2D, calculées selon la formule suivante :  $\rho_{2D} = (\rho_{3D})^{2/3}$ .  $n$  est le nombre de cavités que doit contenir une boîte de simulation 2D carrée de 102.4nm de côté et dont la densité en cavités est  $\rho_{2D}$ .

simuler une population de 10 cavités. Celles-ci possèdent dans un premier temps le même rayon initial  $R_p^0 = 2\text{nm}$ . Nous plaçons également dans notre système une boucle de dislocation de rayon initial  $R_d^0 = 6\text{nm}$ , accord avec les observations faites [figure 4.1](#), sur laquelle nous pouvons voir deux boucles de dislocation par système de montée ( $n_{\text{boucles}} = 2^{2/3} \approx 1$ ). Nous choisissons un pas de grille de 0.1 nm ainsi que des tailles d'interfaces qui garantissent la présence d'au moins 7 points de grille en leur sein, soit  $\tilde{w}_p = 4$  et  $\tilde{w}_d = 4$ . Tous les paramètres de simulation, incluant ceux dont nous venons de justifier le choix, sont donnés [tableau 4.2](#).

Nous choisissons d'aborder notre étude sous un angle statistique, de manière à dégager une influence moyennée d'une boucle de dislocation sur une population de cavités, indépendamment de la position des objets les uns par rapport aux autres. Nous réalisons ainsi 100 simulations du système précédemment décrit. Tous les objets, soient 10 cavités et 1 boucle de dislocation, sont placés aléatoirement dans la boîte de simulation. Nous récupérons ainsi des statistiques sur 1000 cavités et 100 boucles de

2.  $\rho_{2D} = (\rho_{3D})^{2/3}$ ;  $n = \rho_{2D} \times 102.4 \times 102.4$ .

Température $T$	200°C
pas de grille $d$	0.1 nm
largeur d'interface $w_p$	0.4 nm
taille de cœur $w_d$	0.4 nm
volume de relaxation $V^*$	$-0.38\Omega$
Pas de temps $\Delta\tilde{t}$	$10^{-3}$
Critère d'arrêt $\ dc/dt\ _\infty$	$10^{-3}$
Taille de boîte de simulation $L$	102.4 nm
Rayon initial des cavités $R_p^0$	2 nm
Rayon initial de la boucle $R_d^0$	6 nm

TABLEAU 4.2 – Paramètres des simulations pour le recuit d'un échantillon d'aluminium irradié [Jacquelin, 2018]. Les caractéristiques de l'aluminium à 200°C sont données Annexe B.

dislocations. Nous montrons figures 4.14 et 4.15 des cartes de concentration et de contrainte tirées d'une simulation parmi les 100.

À l'aune des études préliminaires menées, nous souhaitons comprendre la nature des interactions entre cavités et dislocations. Nous relevons à cet effet la vitesse de fermeture de l'ensemble des 1000 cavités simulées pour différents instants de simulation. La méthode que nous employons est détaillée figure 4.16 et Annexe F. Nous pouvons en particulier observer sur la figure 4.16a, pour une simulation prise au hasard, que l'évolution des rayons des cavités au cours du temps est assez régulière. Nous réalisons ainsi une régression linéaire du rayon sur une plage de temps  $[t_A, t_B]$  donnée et nous en déduisons la vitesse  $v(t_B)$ . Dans le cadre de cette étude, nous prenons des plages de temps d'1 s, suffisantes pour avoir des résultats significatifs sans pour autant gommer complètement les quelques irrégularités (lorsqu'une cavité est assez proche d'une boucle de dislocation par exemple). L'exemple donné figure 4.16 montre les vitesses obtenues pour  $t = 2$  s.

Nous traçons ensuite figure 4.17 un histogramme des vitesses de fermeture des cavités prises à différents temps au cours des simulations. Nous discriminons également les cavités suivant un critère d'isolement que nous détaillons maintenant. Nous définissons un rayon de coupure  $R_{\text{cut}}$ . Pour chaque cavité, nous définissons une zone circulaire centrée sur le centre de la cavité considérée et de rayon  $R_{\text{cut}}$ . Puis nous comptons combien de cavités se trouvent dans cette zone. Une cavité est considérée comme appartenant à cette zone à partir du moment où son centre y est inclus. La cavité est considérée isolée au regard de ce critère si aucune autre cavité ne se trouve à moins de  $R_{\text{cut}}$  d'elle. Nous définissons ainsi des groupes de 2, 3, 4 cavités et plus. Toutes ces étapes sont réalisées *via* la routine python `sklearn.cluster.DBSCAN`<sup>3</sup> [Pedregosa *et al.*, 2011]. Dans les résultats présentés, nous avons fixé  $R_{\text{cut}} = 10$  nm, soit une distance assez grande devant le rayon initial des cavités et plus petite que la distance moyenne au premier voisin (ici égale à 18.5 nm), de sorte que nous pouvons utiliser

3. [https://scikit-learn.org/stable/auto\\_examples/cluster/plot\\_cluster\\_comparison.html#sphx-glr-auto-examples-cluster-plot-cluster-comparison-py](https://scikit-learn.org/stable/auto_examples/cluster/plot_cluster_comparison.html#sphx-glr-auto-examples-cluster-plot-cluster-comparison-py)

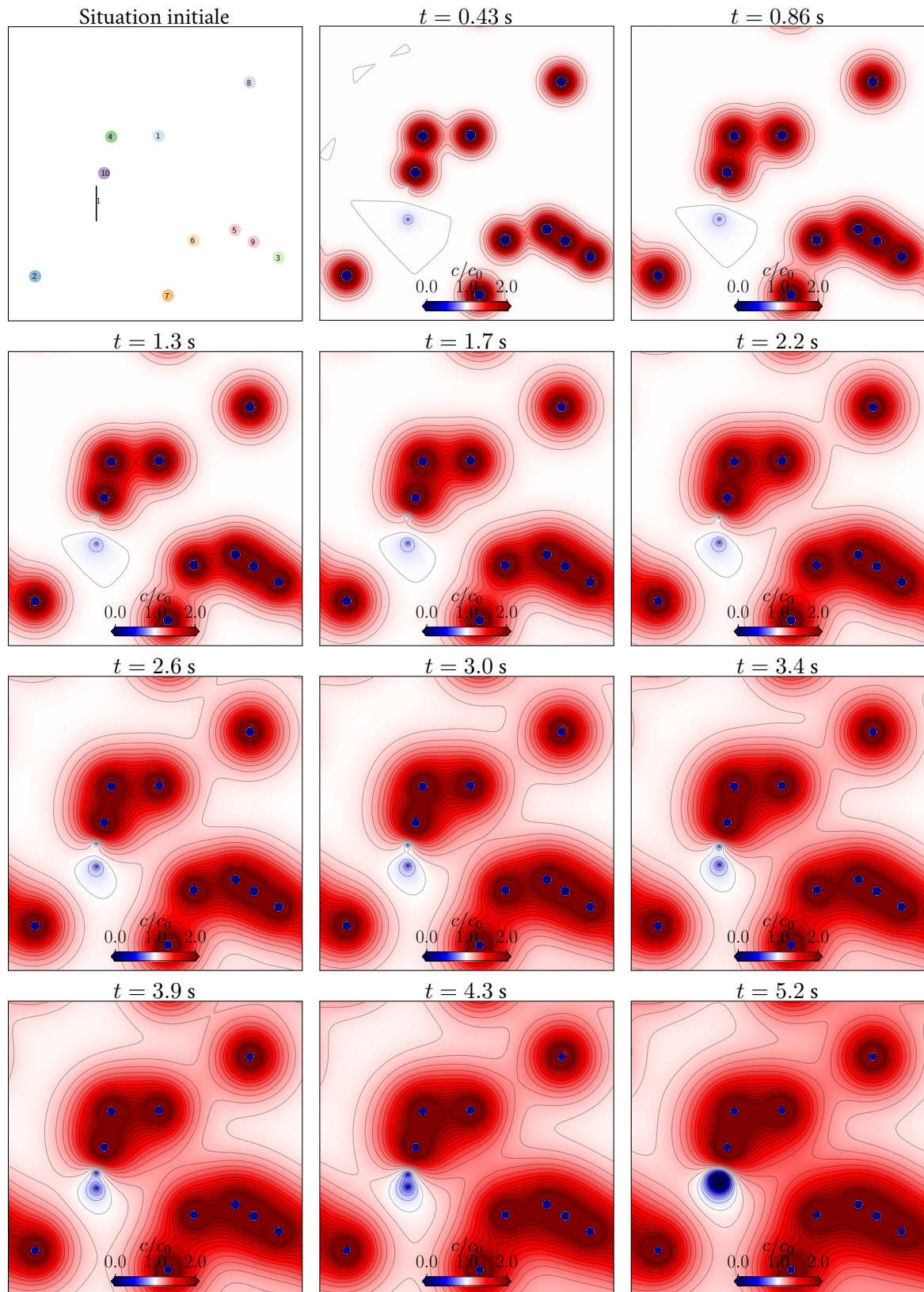


FIGURE 4.14 – Cartes du champ  $c/c_0$ . Sur le schéma de la situation initiale, les cavités sont représentées par des ronds de couleur (une couleur par groupe, selon le critère d'exclusion  $R_c = 10$  nm), la boucle par un trait noir.

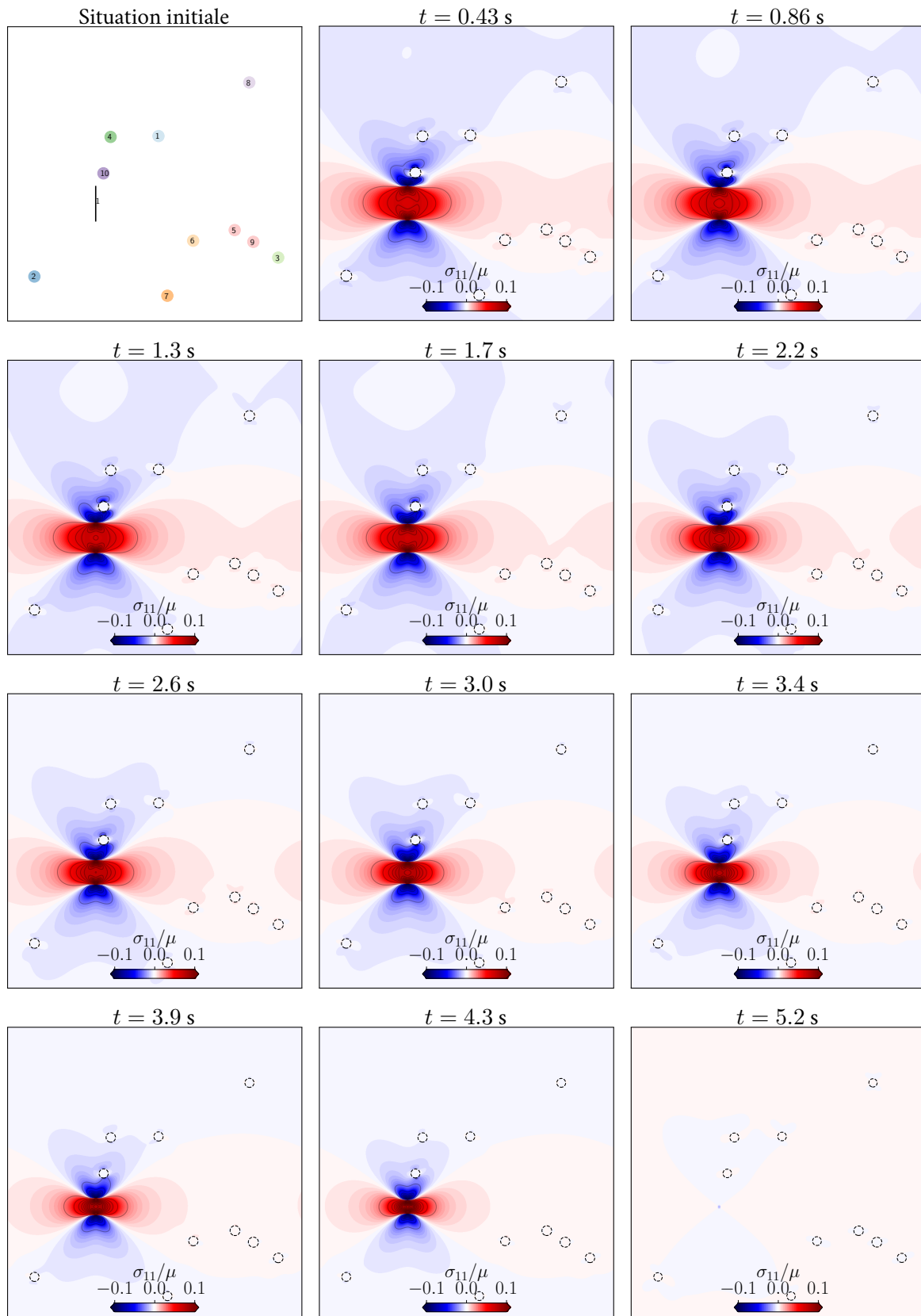
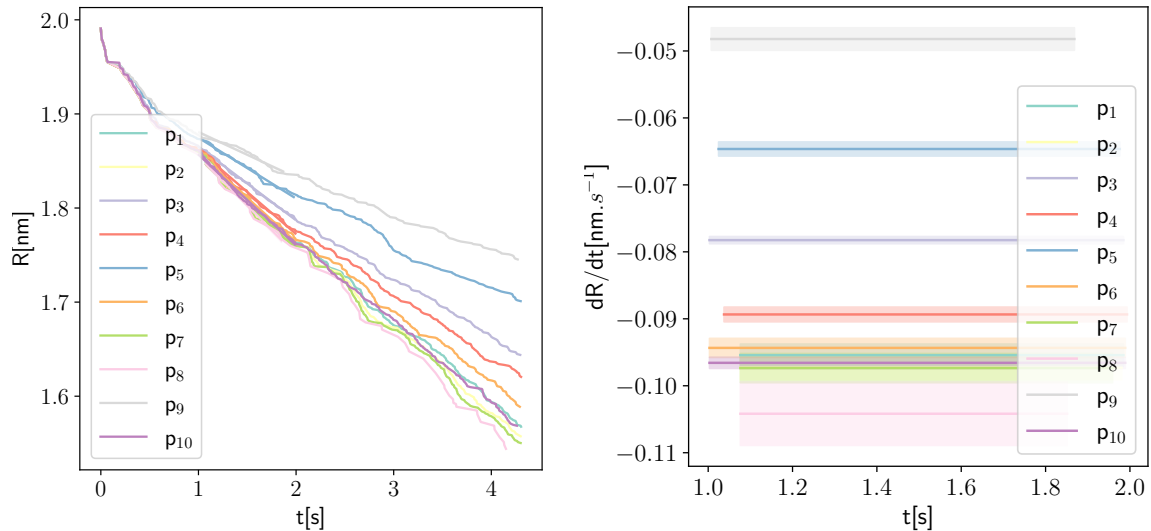


FIGURE 4.15 – Cartes du champ du champ de contrainte  $\sigma_{11}/\mu$ , où  $\mu = C_{44}$  est le coefficient de cisaillement. La situation initiale est schématiquement représentée (voir figure 4.14 pour la légende).



(a) Évolution des rayons des cavités  $\{p_i\}_{i=1,10}$  au cours du temps. (b) Vitesses  $dR/dt$  des cavités  $\{p_i\}_{i=1,10}$  à  $t = 2$  s, avec incertitudes (voir Annexe F).

FIGURE 4.16 – Obtention de la vitesse de fermeture des cavités à  $t = 2$  s pour la simulation dont les cartes de concentration et de contraintes sont présentées figures 4.14 et 4.15. Une régression linéaire est faite sur la plage de temps  $[1, 2]$  s.

les conclusions établies section 4.1.1. Aucun groupe de plus de 4 cavités n’a été trouvé selon ce critère. Sur les histogrammes présentés figure 4.17, à chaque groupe est associée une couleur. Nous indiquons également, pour comparaison, une vitesse de référence  $v_0$ , qui est la vitesse de fermeture d’une cavité isolée, dans un milieu tel que défini figure 3.1 et caractérisé par les conditions aux limites suivantes : aux bords d’une sphère de  $R_{k_1}$  est appliquée la concentration  $c_0$ . Le rayon  $R_{k_1}$  est la distance moyenne au premier voisin observée sur les 100 simulations, ici égale à 18.5 nm.

Nous commentons maintenant les histogrammes présentés figure 4.17. Nous constatons premièrement que l’aspect général change peu au cours du temps. Dans les quatre diagrammes présentés, nous observons un pic et un étalement sur la gauche, vers les vitesses de fermeture les plus faibles. En observant la position des histogrammes par rapport à la vitesse de décroissance pour une cavité isolée  $v_0$ , donnée en trait pointillé ocre, nous constatons qu’une très grande partie des cavités (isolées ou pas) décroissent plus lentement que dans le cas où elles sont isolées.

Nous analysons dans un premier temps le lien entre la taille d’un groupe, *ie* le nombre de cavités qui le composent, et la vitesse de décroissance de ces dernières. Quel que soit le temps de simulation auquel l’histogramme est réalisé, nous remarquons la même répartition des groupes. Les cavités dont les vitesses de décroissance sont les plus grandes sont majoritairement considérées comme isolées (couleur bleue sur les histogrammes) tandis que les cavités groupées (couleurs orange, verte et rouge) décroissent plus lentement. Lorsque les cavités sont groupées, leur décroissance est ralentie. Ceci est tout à fait logique au vu des conclusions tirées section 4.1.1. Si nous ne pouvons appliquer ici directement les formules issues de notre modèle analytique, faute de limites claires pour notre système (ceci



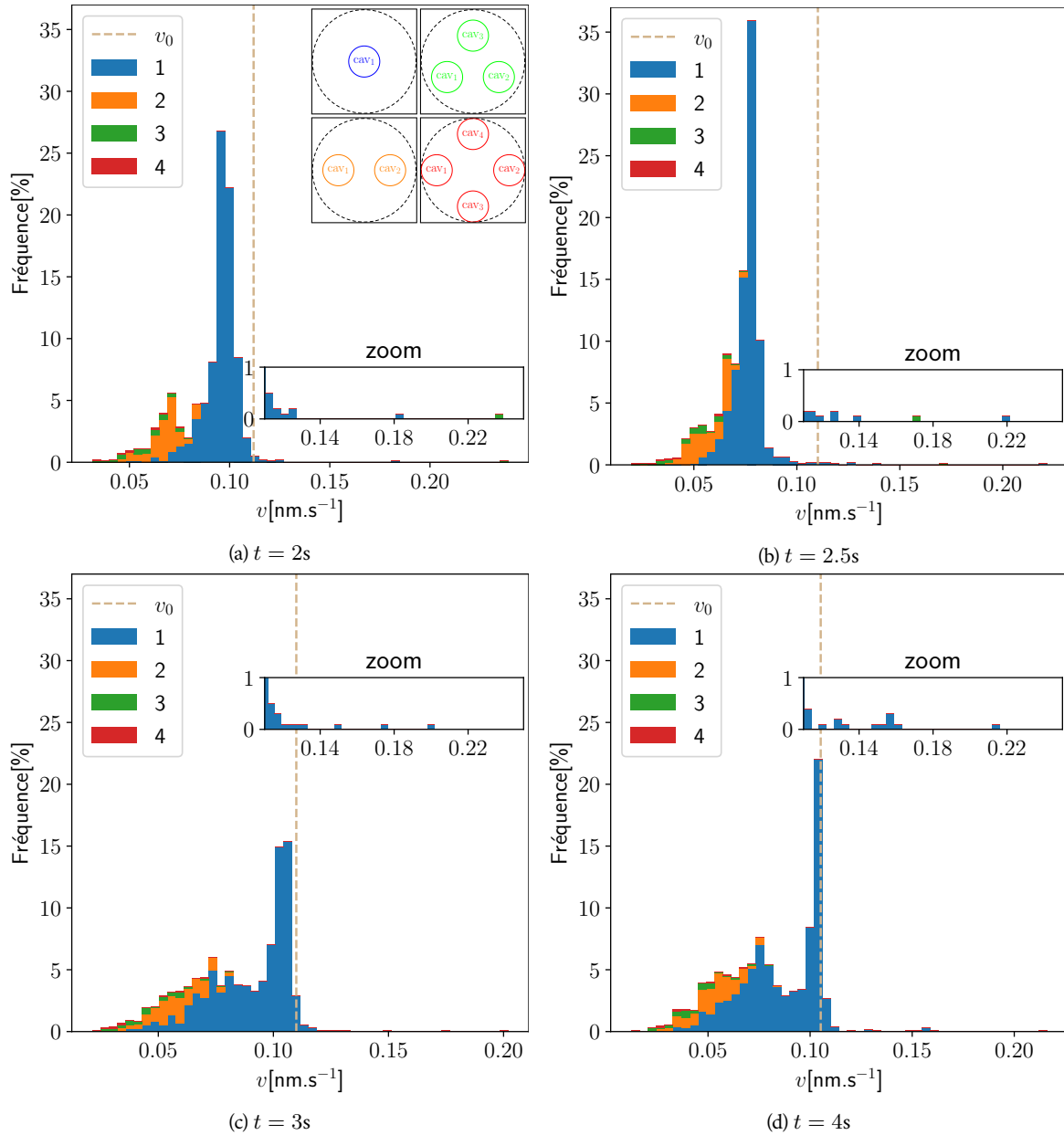


FIGURE 4.17 – Histogrammes des vitesses de fermeture  $v = -dR/dt$  pour différents temps. Échantillon de 1000 cavités et 100 boucles de dislocation, issues de 100 simulations différentes. Le temps total simulé pour chaque simulation est de 4.3 s. Le rayon de coupe appliqué pour discriminer les groupements de cavités est  $R_{\text{cut}} = 10$  nm. Il s’agit d’histogrammes cumulés; les barres de différentes couleurs s’empilent les unes sur les autres.

est dû à l’application de conditions aux limites périodiques), nous pouvons cependant utiliser la conclusion selon laquelle plus les cavités sont nombreuses à interagir et proches les unes des autres, plus leur décroissance est ralentie.

Il apparaît également que certaines cavités, en nombre restreint, se ferment plus rapidement que celles associées au pic, avec une vitesse supérieure à  $v_0$ . La figure 4.18 montre qu’il s’agit majoritairement de cavités situées très près des boucles de dislocations. Si les cavités « bleues » sur cette figure, dont

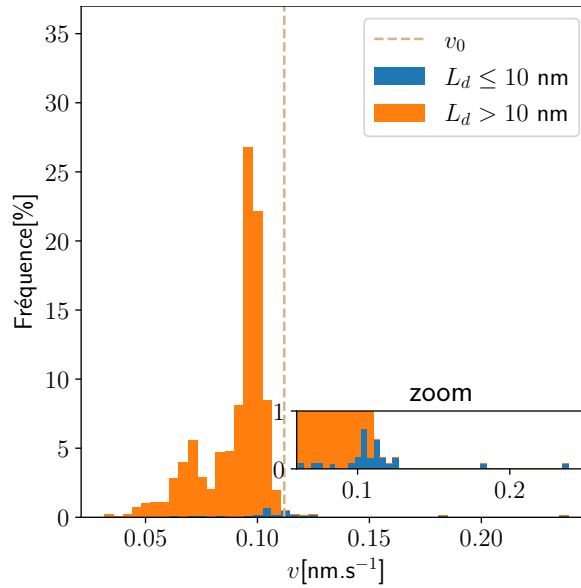
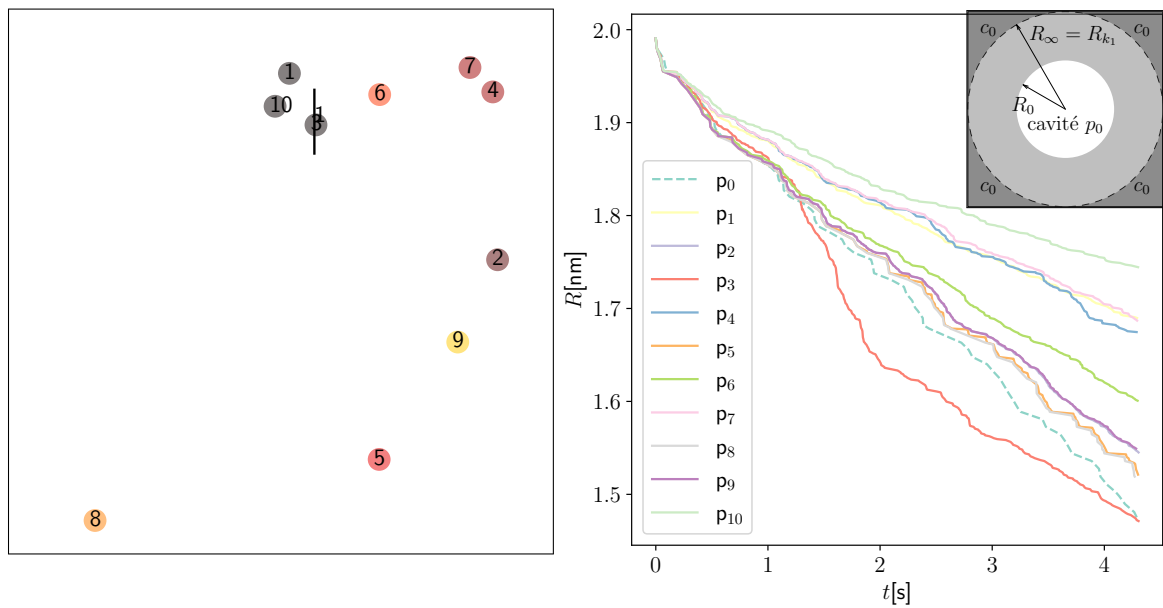


FIGURE 4.18 – Histogramme des vitesses de fermeture à  $t = 2$ s. Les 2 couleurs possibles pour les barres rendent compte d’une discrimination selon la distance  $L_d$  à la boucle de dislocation.



(a) Schéma de la situation initiale. Une couleur correspond à un regroupement selon le critère de regroupement  $R_{cut} =$  temps. Le pore  $p_0$  est une cavité isolée dans un cylindre de rayon 10 nm. Les cavités 1, 10 et 3 font partie du même regroupement de 3 cavités, identifié par un gris anthracite, tandis que le groupe des cavités 7 et 4 est identifié par un marron. (b) Évolution des rayons des cavités  $\{p_i\}_{i=1,10}$  au cours du temps. Le pore  $p_0$  est une cavité isolée dans un cylindre de rayon  $R_{k_1}$  tel que détaillé sur le schéma en haut à droite et dont la vitesse de décroissance  $v_0$  est montrée sur les histogrammes de la figure 4.17.

Les autres cavités, dont les groupes sont identifiés par des couleurs différentes, sont donc considérées isolées.

FIGURE 4.19 – Analyse d’une configuration où la boucle de dislocation se trouve localisée dans un groupe de trois cavités.



le centre est situé à moins de 10 nm du centre de la boucle de dislocation, ne se ferme pas toutes plus rapidement que le pic, c'est parce qu'elles peuvent par ailleurs être freinées par des cavités voisines. Nous en montrons un exemple [figure 4.19](#), où sont décrites les positions des cavités et de la boucle de dislocation pour une simulation donnée. Cette figure présente également l'évolution du rayon des cavités au cours du temps. Nous traçons pour comparaison l'évolution du rayon d'une cavité  $p_0$ , qui correspond à la simulation d'une cavité seule dans un cylindre de rayon  $R_{k_1}$  à la surface duquel est maintenu une concentration en lacunes  $c_0$ . Nous pouvons ainsi comparer l'évolution du rayon des cavités  $p_1$  à  $p_{10}$  à l'évolution de  $p_0$ , où la cavité est considérée comme isolée. Lorsque les cavités sont loin de la boucle de dislocation, nous pouvons voir que leur rayon décroît plus lentement que celui de la cavité  $p_0$ . Pour les cavités très proches de la boucle de dislocation, la cavité  $p_3$  décroît très rapidement entre 1 et 2 s car dans une situation  $(\Delta_x, \Delta_y) = (0, 0)$  (voir [section 4.1.2](#)), alors même qu'elle fait partie d'un groupe de trois cavités. On voit d'ailleurs pour ces dernières (cavités  $p_1$  et  $p_{10}$ ) que l'accélération liée à la proximité de la boucle est compensée voire dépassée par le ralentissement occasionné par la présence proche des autres cavités du groupe.

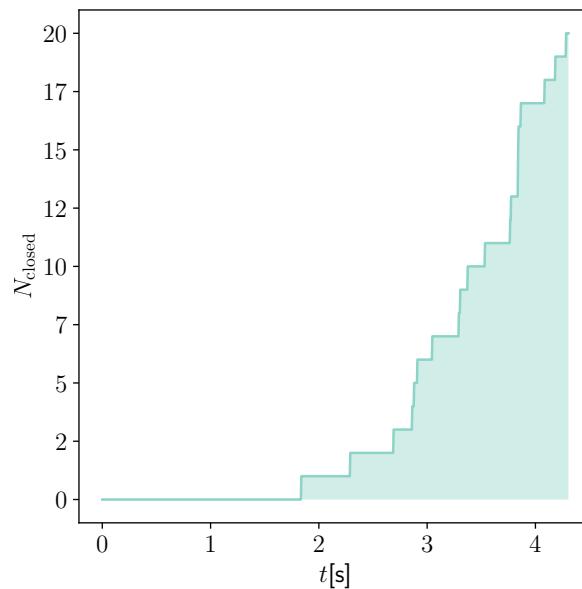
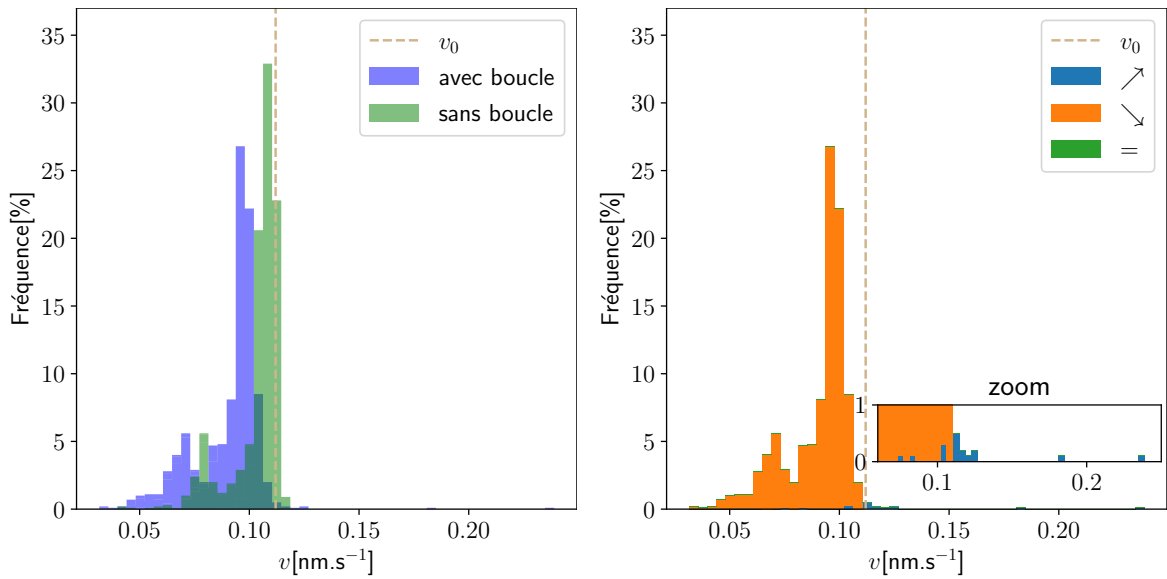


FIGURE 4.20 – Graphique du nombre cumulé  $N_{\text{closed}}$  de boucles fermées au cours du temps.

Nous analysons dans un second temps la position du pic observé dans les histogrammes donnés [figure 4.17](#) relativement à la vitesse  $v_0$ . Les cavités qui composent le pic sont essentiellement isolées au regard du critère d'isolement  $R_{\text{cut}} = 10$  nm (le pic est majoritairement bleu). Nous nous attendons donc à ce que le pic soit centré sur la vitesse d'une cavité isolée  $v_0$ , indépendamment du temps. Or, nous observons pour les [figures 4.17a](#) à [4.17c](#) que le pic est assez éloigné de la vitesse de décroissance  $v_0$ . Seule la [figure 4.17d](#) montre un pic centré sur cette vitesse. En observant les [figures 4.17b](#) à [4.17d](#), nous constatons que le pic se rapproche de  $v_0$  au fur et à mesure du temps. Nous remarquons justement sur la [figure 4.20](#) qu'à partir de  $t = 2$  s (le temps auquel l'histogramme de la [figure 4.17b](#) est réalisé), certaines boucles de dislocations sont complètement fermées. Il semble ainsi exister une corrélation entre le nombre de boucles fermées au cours du temps, donné [figure 4.20](#), et le rapprochement du pic

par valeur inférieure vers la vitesse de référence  $v_0$  observé sur les figures 4.17a à 4.17c.



(a) Comparaison des histogrammes obtenus avec boucle de dislocation et sans boucle.

(b) Sur l'histogramme réalisé avec la boucle, les barres bleues représentent les cavités accélérées en présence de la boucle tandis que les oranges représentent les cavités ralenties.

FIGURE 4.21 – Étude du ralentissement opéré par la présence de la boucle de dislocation. Histogrammes tracés à  $t = 2\text{s}$ .

Afin d'approfondir ce point, nous réalisons la même série de 100 simulations (la position des cavités reste inchangée) en omettant cette fois-ci la boucle de dislocation. Nous présentons figure 4.21a une comparaison des deux histogrammes obtenus pour  $t = 2\text{s}$ , avec et sans la boucle de dislocation. Nous présentons également figure 4.21b une cartographie des cavités accélérées ou ralenties par la présence de la boucle de dislocation. Sur la figure 4.21a, nous pouvons constater que l'histogramme produit lorsque la boucle de dislocation est absente est quasiment identique à celui produit avec, mais décalé vers la droite, signe d'une accélération collective de la décroissance des cavités. Nous remarquons que le pic de cet histogramme, pour lequel la boucle est absente des simulations, est centré sur la vitesse  $v_0$ . En associant cette figure à la figure 4.21b, nous remarquons que la quasi-totalité des cavités ont été ralenties en présence de la boucle de dislocation. Les seules exceptions sont les cavités situées suffisamment près de la boucle, à en juger la correspondance parfaite entre les figures 4.18 et 4.21b. Il s'agit là d'un résultat contre-intuitif dans le sens où les situations que nous avons étudiées section 4.1.2 rendent compte d'une accélération de la fermeture d'une cavité en présence d'une boucle de dislocation. D'un point de vue strictement diffusif, il est en effet logique que la présence d'une dislocation, constituant un puits de lacunes, engendre une accélération de la fermeture de la cavité, quelle que soit la distance séparant les deux objets. C'est d'ailleurs un des résultats mis en avant dans le modèle analytique de Rovelli *et al.* [2017].

Nous n'arrivons ainsi pas à expliquer les résultats obtenus par une approche uniquement diffusive. Nous avons montré section 4.1.2 le rôle important que jouait l'élasticité dans les interactions cavité-

boucle de dislocation. Nous nous proposons donc d'étudier plus en détail les interactions élastiques entre ces deux objets.

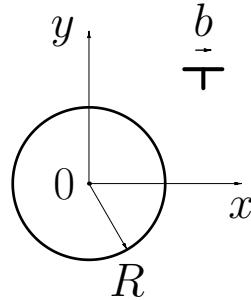


FIGURE 4.22 – Schéma du système 2D et notations introduites pour le calcul de l'énergie d'interaction élastique donnée par l'équation (4.22).

Nous nous ramenons au problème décrit figure 4.22 dans lequel une cavité interagit avec une dislocation coin. Un repère \$(O, x, y)\$ permet de repérer la position des deux objets. Nous étudions les interactions élastiques entre les deux objets. À deux dimensions, en considérant le plan comme infini, ce problème possède une solution analytique. Lubarda *et al.* [2004] l'utilise pour décrire la croissance de pores par émission de dislocations. Cette formulation analytique a été amenée par les études successives de Dundurs *et al.* [Dundurs et Hete'nyi, 1961; Hetényi et Dundurs, 1962; Dundurs et Mura, 1964; Dundurs, 1969] qui traitent de l'interaction d'une inclusion sphérique avec une dislocation coin dans un milieu élastique isotrope. Dundurs et Mura [1964] constitue l'aboutissement des deux articles le précédant et donne une formule analytique pour l'énergie d'interaction élastique entre ces deux objets. Nous la redonnons ci-après en utilisant le cadre donné figure 4.22, dans le cas où l'inclusion est une cavité :

$$E_{\text{int}}^{\text{el}} = -\frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)} \left[ \frac{x^2 R^2}{(x^2 + y^2)^2} + \ln \left( \frac{x^2 + y^2}{x^2 + y^2 - R^2} \right) \right] \quad (4.22)$$

Nous souhaitons nous assurer que l'expression de cette énergie d'interaction élastique prédit bien des situations déjà observées précédemment et comprises. Nous pensons en particulier à la situation \$(\Delta\_x, \Delta\_y) = (2, 4)\$ au cours de laquelle un des cœurs est « piégé » dans l'interface de la cavité. Cette situation correspond à \$x = R, y = 0\$. Puisque la dislocation est contrainte de se déplacer dans le plan \$y = 0\$, nous dérivons l'équation (4.22) selon \$y\$ pour obtenir la relation suivante :

$$\frac{\partial E_{\text{int}}^{\text{el}}}{\partial y} = -\frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)} \left[ \frac{2R^2 y (2R^2 x^2 - 4x^2 y^2 - 3x^4 - y^4)}{(x^2 + y^2)^3 (x^2 + y^2 - R^2)} \right] \quad (4.23)$$

Il est clair que cette fonction n'est pas analytique en \$(x = R, y = 0)\$. En fait, dans le modèle champ de phase, le cœur de la dislocation a une épaisseur non nulle contrairement à ce qui est supposé dans l'équation (4.22). De manière à rendre compte approximativement de cette épaisseur finie, nous pouvons considérer que la position de la dislocation, par rapport à la surface de la cavité, est de l'ordre du pas de grille \$d\$, qui est également la mesure de l'étalement du cœur. En supposant que le rayon de la

cavité est suffisamment grand vis à vis de  $d$ , ce qui est toujours le cas, nous obtenons :

$$\left. \frac{\partial E_{\text{int}}^{\text{el}}}{\partial y} \right|_{x=R+d} \approx \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)} \frac{y}{Rd} \quad (4.24)$$

La position  $y = 0$  correspond donc à un minimum d'énergie élastique. Par conséquent une dislocation coin placée à l'interface de la cavité n'en sortira pas. Et c'est exactement ce que nous observons figures 4.11 et 4.12.

Pour connaître l'impact de la dislocation sur la fermeture du pore, nous dérivons l'équation (4.22) par rapport au rayon du pore  $R$ . Nous obtenons la formule suivante :

$$\frac{\partial E_{\text{int}}^{\text{el}}}{\partial R} = -\frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)} \left[ \frac{2Rx^2}{(x^2 + y^2)^2} + \frac{2R}{x^2 + y^2 - R^2} \right]. \quad (4.25)$$

En remarquant que  $x^2 + y^2 = r^2$  où  $r$  est la distance de la dislocation au centre de la cavité, nous pouvons ré-écrire cette formule de la manière suivante :

$$\frac{\partial E_{\text{int}}^{\text{el}}}{\partial R} = -\frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)} \times 2R \left[ \frac{x^2}{r^4} + \frac{1}{r^2 - R^2} \right] \quad (4.26)$$

Nous pouvons premièrement remarquer que puisque  $r \geq R$ , cette dérivée est toujours négative. Un mouvement  $dR < 0$  de fermeture du pore engendrera une création d'énergie d'interaction élastique, ce qui est défavorable. Quelle que soit la position de la dislocation par rapport à la cavité, les interactions élastiques ralentiront sa fermeture. Cette observation corrobore bien les observations *a priori* contre-intuitives que nous avons faites figure 4.21. En revanche, un mouvement  $dR > 0$  de croissance d'une cavité sera au contraire favorisé d'un point de vue élastique [Lubarda *et al.*, 2004]. Enfin, en faisant tendre  $r$  vers  $+\infty$ , nous remarquons que l'apport énergétique tend bien vers 0, ce qui pourrait justifier que Rovelli *et al.* [2017], au nom de l'hypothèse d'une solution diluée, ne prenne pas en compte les interactions élastiques dans son modèle.

## Conclusion

Nous avons simulé une situation de recuit d'une population de cavités, toutes de mêmes rayons initiaux, en présence d'une boucle de dislocation, dans un échantillon d'aluminium après irradiations. Nous observons bien une fermeture des cavités à 200°C comme attendu au vu des clichés expérimentaux montrés dans Jacquelin [2018]. Nous avons montré que l'effet de la présence de dislocations sur la fermeture de cavités est le résultat de deux mécanismes opposés. Tout d'abord, les dislocations sont des puits de lacunes ce qui contribue à accélérer la disparition des cavités. Ensuite, les interactions élastiques entre dislocations et cavités contribuent à un ralentissement de la fermeture des cavités. Il y a donc deux régimes, l'un dominé par des mécanismes diffusifs et l'autre dominé par des mécanismes élastiques. À courte portée, la diffusion l'emporte et la décroissance des cavités est grandement accélérée. C'est dans ce régime que nous nous sommes placés lors de l'étude réalisée section 4.1.2. À longue distance en revanche, la présence d'une dislocation freine la fermeture des cavités. Ces résultats sont le fruit de simulations 2D et méritent des considérations 3D, pour lesquelles il n'existe malheureusement pas équivalent analytique simple auquel se comparer.

#### 4.1.4 Prise en compte d'effets de taille finie

Dans cette partie, nous reprenons l'étude de la cinétique de fermeture d'une cavité 3D comme nous l'avons abordée dans le [chapitre 2](#), mais en considérant cette fois la présence de surfaces libres à proximité. Ces effets de taille finie sont importants à caractériser car ils sont susceptibles d'intervenir dans de nombreuses situations expérimentales où par exemple les échantillons étudiés sont des lames minces observées en microscopie électronique à transmission (TEM). Nous considérons pour cela le système

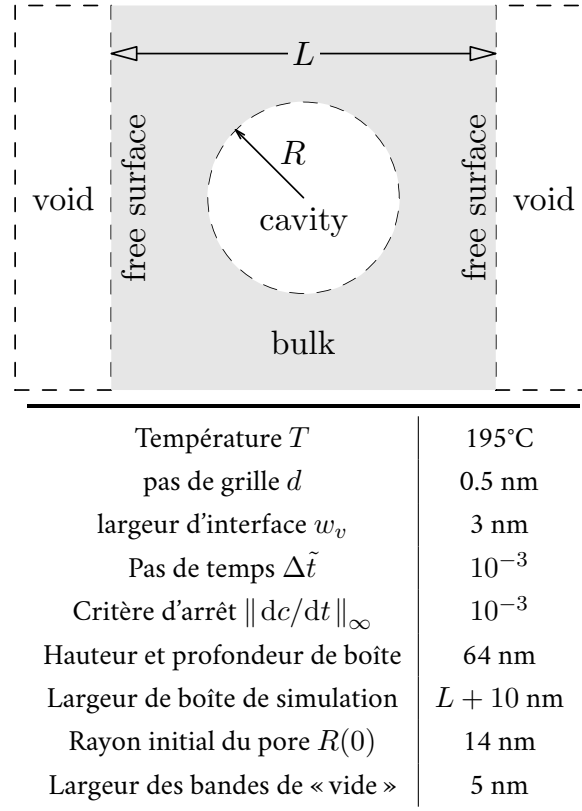


FIGURE 4.23 – Schéma de la situation initiale des simulations concernant l'influence de surfaces libres sur la fermeture d'un pore.

3D décrit sur la figure [figure 4.23](#) où une cavité de rayon initial 14 nm est située dans le plan médian entre deux surfaces libres, distantes de  $L$ . Ces surfaces sont délimitées par le champ  $\eta$ . Elles sont en particulier libres de se déformer. Les « bandes de vide » sont d'une largeur supérieure à la taille de leur interface, soit  $10d$ . Nous appliquons des conditions aux limites périodiques. La matrice est initialement placée à l'équilibre. Nous n'appliquons pas de contrainte. Les paramètres matériau sont ceux de l'aluminium pur (voir [Annexe B](#)), à 195°C. Nous observons l'influence de la proximité des surfaces libres avec la cavité sur la dynamique de fermeture de cette dernière en faisant varier  $L$ , de 50 à 100 nm, ce qui est typiquement l'ordre de grandeur de l'épaisseur des lames minces utilisées en microscopie électronique.

Nous montrons [figure 4.24](#) l'évolution du rayon  $R$  de la cavité en fonction du temps pour différentes épaisseurs de lame  $L$ . Nous traçons sur cette figure l'équation (3.40) où  $R_{\infty} \rightarrow \infty$ , qui représente une épaisseur de lame infinie. Nous observons ainsi que plus la lame est fine, plus la fermeture de la cavité

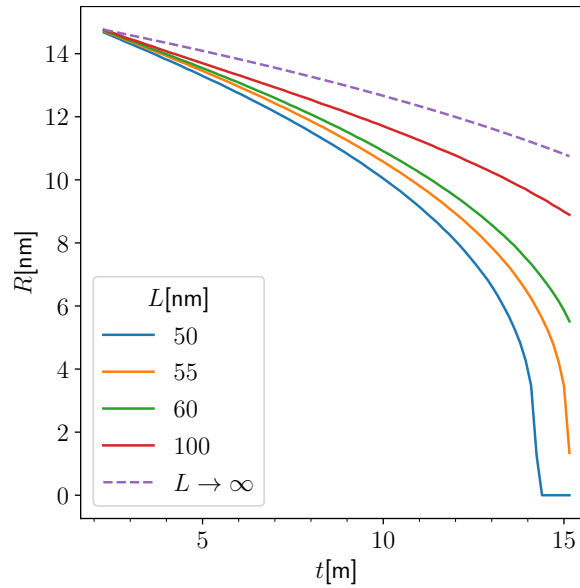


FIGURE 4.24 – Courbes  $R(t)$  pour plusieurs distances  $L$ . L'asymptote  $L \rightarrow \infty$  est l'équation (3.40) où  $R_\infty \rightarrow \infty$ .

se fait rapidement. Nous donnons figures 4.25 et 4.26 des visuels 3D ainsi que des cartes de champs de concentration. Nous pouvons ainsi remarquer que les surfaces laissées libres et initialement droites, se courbent car les lacunes émises par la cavité rejoignent principalement la surface libre dans la région la plus proche de la cavité. Dans un système réel, la diffusion rapide d'atomes en surface ne permet pas forcément de voir de telles courbures.

Nous constatons figure 4.24 que les effets de taille finie des systèmes réel peuvent avoir une influence significative sur les cinétiques de fermeture de cavités caractérisées expérimentalement. C'est notamment le cas lorsque des phénomènes diffusifs sont impliqués, les surfaces libres constituant des puits de lacunes très efficaces. Ceci étant dit, d'autres ingrédients physiques, comme la présence de gaz par exemple, ont un impact bien plus grand sur la cinétique de fermeture des pores [Bhattacharya *et al.*, 2018] et nécessiteraient une prise en compte pour un modèle plus complet [Westmacott et Smallman, 1970]. Pour la cinétique de bulles de gaz en champ de phase, nous redirigeons vers les travaux de Millett *et al* [Millett *et al.*, 2011a,b].

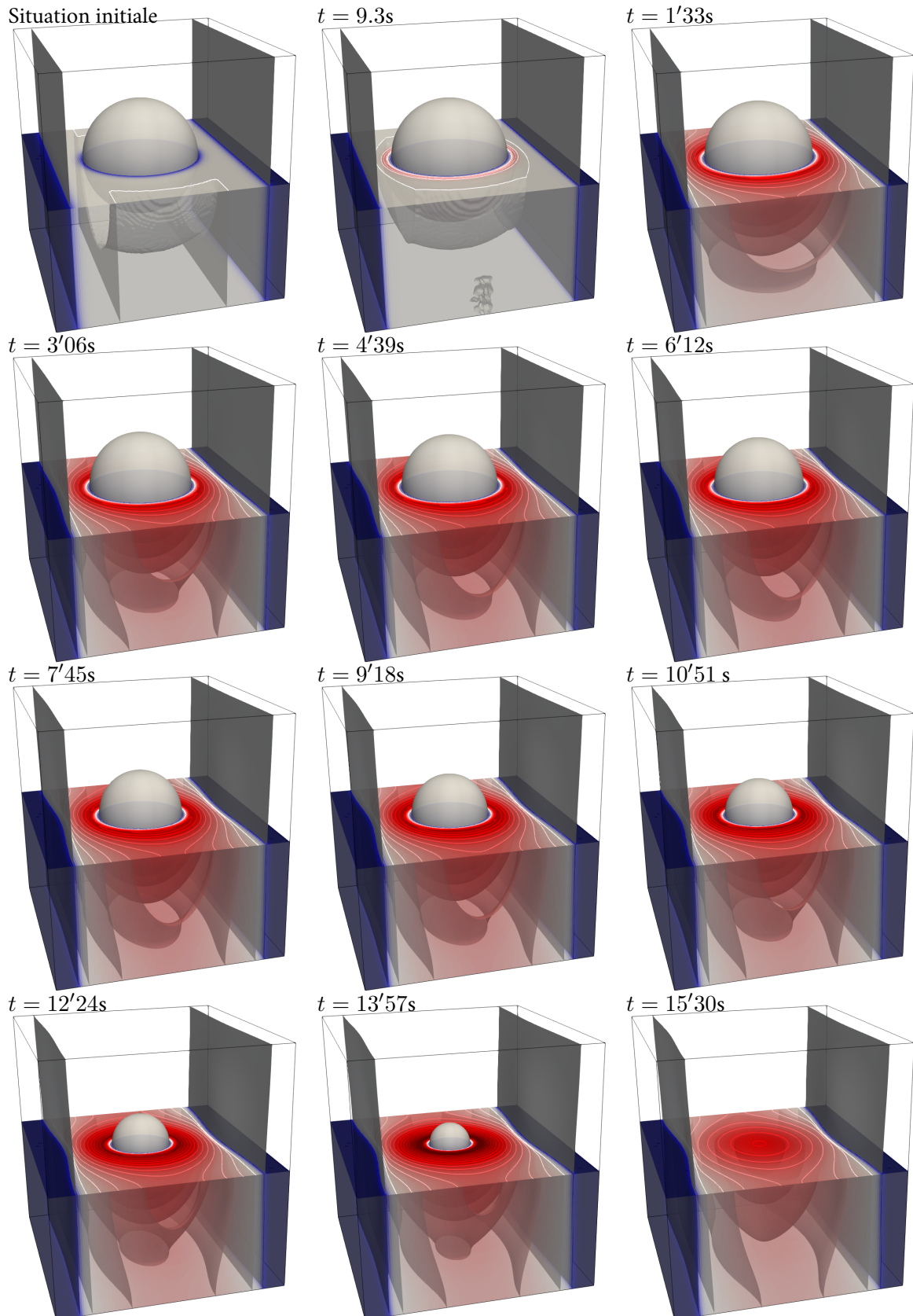


FIGURE 4.25 – Fermeture d'un pore de 30 nm dans une lame mince de 50nm. Champ  $c/c_0$  avec iso-surface. Iso-surfaces  $\eta = 0.5$  (surface du pore et limites de la lame mince) en blanc.



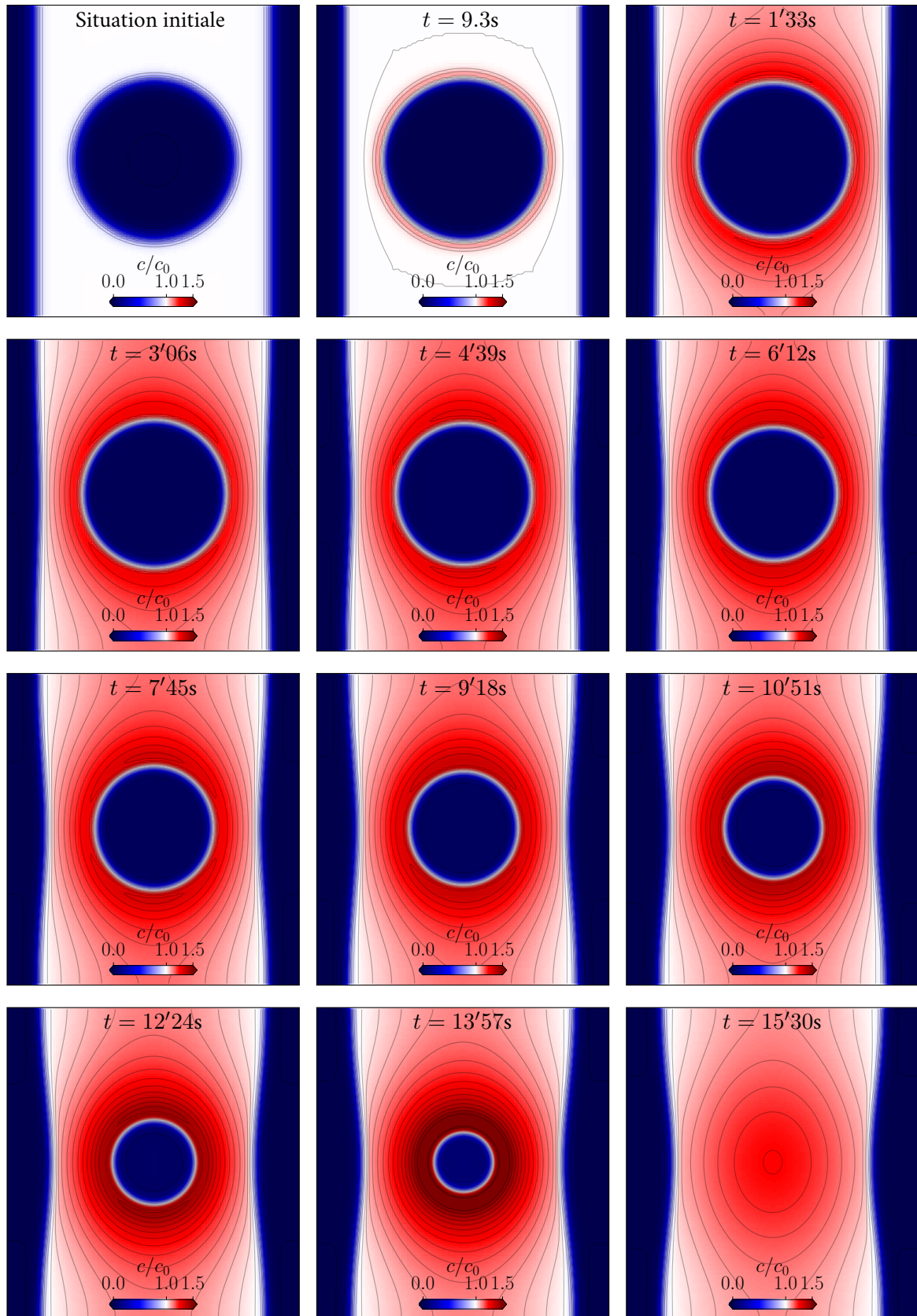
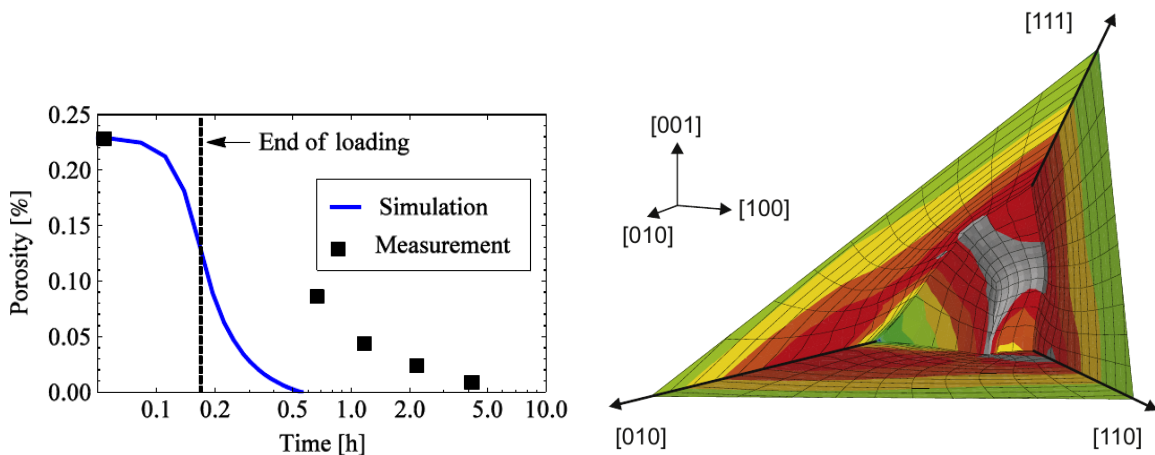


FIGURE 4.26 – Fermeture d'un pore de 30 nm dans une lame mince de 50nm. Cartes du champ  $c/c_0$ .



## 4.2 Pistes pour l'étude de l'évolution de pores de tailles micrométriques sous contrainte et en présence de dislocations

Nous souhaitons désormais étudier le comblement de pores de solidification par Pressage Isostatique à Chaud (HIP) dans des alliages base nickel. Ces alliages entrent dans la compositions de pièces cruciales dans le domaine de l'aéronautique comme les aubes de turbine de turboréacteur. Leur obtention par solidification dirigée favorise la formation de pores dans les zones inter-dentritiques [Epishin *et al.*, 2013b]. Ces pores, de tailles micrométriques, favorisent la nucléation de fissures qui limitent la tenue en fatigue de l'alliage. Afin de réduire la porosité de ces alliages, un processus de pressage isostatique à chaud (HIP) est utilisé. Ce processus est déjà utilisé à une échelle industrielle et a fait l'objet de nombreuses études, notamment dans les poudres [Cahn et Haasen, 1983; Atkinson et Davies, 2000]. Les processus élémentaires en jeu restent cependant mal compris par la communauté scientifique. Récemment, Epishin *et al.* [2013a] et Epishin *et al.* [2014] ont utilisé des modèles de plasticité cristalline en grande déformation et ont mené des campagnes expérimentales pour comprendre les mécanismes physiques à l'œuvre dans le HIP. Les simulations faites dans ces études n'arrivent cependant pas à prédire les microstructures observées lors des expériences. D'une part les cinétiques de fermeture obtenues par simulations sont un ordre de grandeur plus grande que celles observées (voir figure 4.27a). D'autre part la morphologie des pores simulés est très anisotrope (voir figure 4.27b), en contradiction avec la forme souvent sphérique des pores observés. Cette différence s'explique probablement par l'absence de prise en compte dans le modèle proposé par Epishin *et al.* [2013a] de la tension de surface des pores.



(a) Évolution de la porosité lors d'un traitement HIP 1288°C / 103 MPa sur un alliage CMSX-4. Comparaison modélisation expérience.

(b) Carte de la contrainte plastique résiduelle après 10 minutes de HIP. Nous voyons ici 1/8ème du pore simulé. La fermeture du pore n'est pas isotrope.

FIGURE 4.27 – Résultats de simulations dans le cadre de l'étude du HIP sur le CMSX-4 [Epishin *et al.*, 2013a].

Epishin *et al.* [2018] considère la situation où le pore est au milieu d'un grain. Les joints de grains de faible désorientation (LAB) sont modélisés par des dislocations. La formule analytique ainsi obtenue ne considère que la diffusion et aboutit à la même formule que celle déjà présentée dans l'équation (3.50). Même en considérant une densité de pores de tailles différentes, l'évolution de la porosité au cours

du HIP prédite par le modèle analytique ne permet pas de retrouver la courbe expérimentale (voir [figure 4.28](#)). [Epishin et al. \[2018\]](#) montre cependant l'importance de la prise en compte de la distribution de taille des pores, ce que l'on voit bien dans la [figure 4.28](#).

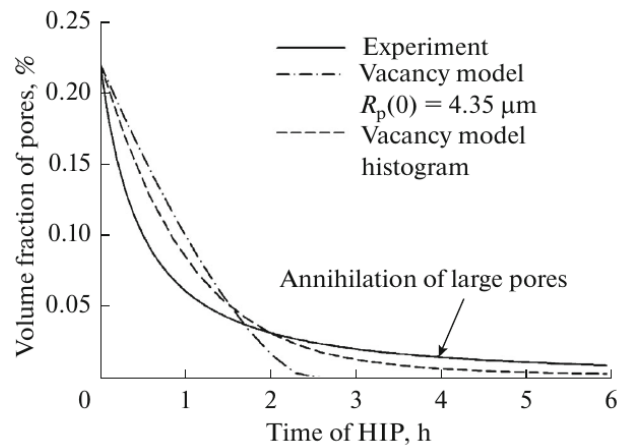


FIGURE 4.28 – Cinétiques de fermetures de pores dans le CMSX-4 sous HIP [[Epishin et al., 2018](#)]. La courbe en trait plein représente les résultats expérimentaux tandis que les courbes en pointillé correspondent aux prédictions du modèle analytique ne considérant que la diffusion de lacunes.

Pour expliquer ces écarts, des études qui prennent en compte davantage de phénomènes physiques doivent être considérées. C'est par exemple ce qui est proposé dans un travail récent réalisé au laboratoire [[Ruffini et al., 2022](#)] où les interactions entre des dislocations glissiles et un pore ont été étudiées. Des observations issues d'expérience montraient déjà que les pores se forment préférentiellement dans les joints de faible désorientation. Dans [Ruffini et al. \[2022\]](#), il est démontré théoriquement et numériquement que le positionnement de pores au sein de joints de grain est une situation énergétiquement favorable (que le pore préexiste au sein du joint ou attire à lui des dislocations venant s'agencer pour former un joint). Il serait donc intéressant d'utiliser le modèle développé durant cette thèse pour étudier le couplage cinétique entre un pore et un joint de faible désorientation, en partant d'une situation stable pour le glissement [[Ruffini et al., 2022](#)]. Les dislocations se déplaceront par montée. La taille et la forme du pore pourront évoluer en réponse à la diffusion lacunaire dans l'alliage. Le modèle prendra en compte l'anisotropie élastique ainsi que la tension de surface du pore. Nous pourrions faire varier la position relative du pore et du joint de faible désorientation. L'importance d'une distribution de taille de pore pourra également être analysée en étudiant l'effet de la taille du pore sur sa vitesse de décroissance. Notons enfin que le modèle tel qu'il est écrit est limité à un alliage binaire, mais un modèle multi-composants est en cours de développement au LEM dans le cadre d'un projet sur les porosités générées par effet Kirkendall ([V. Szczepan et al., à paraître](#)).

### 4.3 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons décrit des interactions complexes entre dislocations et cavités de tailles nanométriques. En prenant appui sur des situations tirées de campagnes expérimentales, nous avons compris plusieurs aspects de ces interactions. Nous avons expliqué un effet contre-intuitif ob-

servé lorsque des boucles de dislocations interagissent avec une population de cavités. Nous n'avons malheureusement pas pu porter ces considérations à des échelles supérieures, dans la cadre du HIP. Nous avons cependant établi une situation de simulation que nous pensons de nature à éclairer notre compréhension du HIP, et donc des interactions de montée de dislocations avec un pore de taille micrométrique.

## CONCLUSION & PERSPECTIVES

### Conclusion

La compréhension des mécanismes physiques à l'origine de la microstructure de défauts dans les matériaux métalliques soumis à des conditions extrêmes (température, pression, irradiation) est essentielle pour prédire leur comportement et assurer la sécurité des équipements auxquels ces matériaux sont intégrés. Expérimentalement, grâce au développement de dispositifs qui permettent de suivre l'évolution d'une microstructure *in situ* ou encore grâce au développement de techniques permettant de figer une microstructure pour pouvoir l'observer *post-mortem*, il est possible d'identifier les possibles mécanismes à l'œuvre. Ces études expérimentales permettent en outre de mesurer et quantifier certaines grandeurs physiques d'intérêt (volumes atomiques, coefficients de diffusion, etc.) qui peuvent être introduits dans des descriptions numériques. Des modélisations numériques peuvent ainsi être envisagées pour reproduire des systèmes d'intérêt susceptibles de se comparer quantitativement aux situations expérimentales. L'intérêt de l'approche numérique est de pouvoir tenir compte ou non d'un ou plusieurs phénomènes physiques élémentaires dont il est alors possible de quantifier les contributions relatives lors d'études numériques systématiques de l'évolution des microstructures. C'est cette versatilité, permise par les simulations, qui permet bien souvent d'expliquer des résultats issus d'observations expérimentales où isoler la contribution d'un phénomène en particulier est une tâche bien plus difficile. Dans les secteurs industriels stratégiques tels que le nucléaire ou l'aéronautique, c'est la nécessité de disposer de modèles numériques quantitatifs pour l'étude des matériaux et de la compréhension des interactions entre montée de dislocations, lacunes et cavités qui ont motivé le développement du modèle numérique détaillé dans mes travaux de thèse.

Nous avons dans un premier temps justifié le choix de la méthode champ de phase pour aborder l'étude numérique de ces couplages multi-physiques en élaborant une revue des différentes techniques de simulation à notre disposition. Il s'avère que le champ de phase propose un cadre thermodynamique et monolithique qui permet de reproduire des éléments aussi variés que des cavités, des lacunes et des

dislocations. Nous avons ainsi détaillé dans un second temps la construction d'un modèle champ de phase qui intègre ces éléments dans un cadre qui reste variationnel et contraint par les principes physiques fondamentaux. Les lois d'évolution des différents champs considérés dérivent ainsi directement de considérations thermodynamiques au contraire d'autres modèles de la littérature dans lesquels des termes d'échange sont rajoutés sans justification. Nous avons également détaillé l'implémentation numérique de notre modèle. Nous avons en particulier tiré parti de l'évolution quasi statique de champ de lacunes par rapport à l'évolution des autres champs pour proposer une méthode de résolution numérique efficace et optimisée. Nous avons dans un troisième temps étudié l'influence des paramètres ajustables du modèle. En simulant des situations pour lesquelles nous avons déterminé au préalable une solution analytique, nous avons pu ajuster nos paramètres d'intégration numérique de manière à ce que les simulations numériques rendent compte de l'évolution d'interfaces 2D (surface d'un pore) et 1D (ligne de dislocation) uniquement gouvernées par la diffusion de lacunes. Nous nous sommes assurés que notre modèle reproduisait bien les effets physiques attendus en présence d'interfaces courbes. Nous nous sommes enfin donné des contraintes numériques justifiées permettant de limiter la présence de lacunes dans les cavités en agissant sur la courbure de l'énergie chimique. Dans un quatrième temps, nous avons simulé une situation 2D proche de celle observée lors de recuits après irradiations dans de l'aluminium. Nous avons ainsi pu décrire qualitativement les interactions entre cavités, avec ou sans dislocations. Au terme d'une étude statistique, nous avons ainsi fait apparaître l'effet élastique antagoniste induit par la présence de dislocations sur la décroissance de cavités dans la microstructure.

## Perspectives

S'agissant des études sur les matériaux irradiés, une première perspective intéressante serait de modifier notre formulation champ de phase pour tenir compte de la présence de gaz dans les cavités. Ce type de modification ne nous semble pas trop difficile à mener et permettrait de modéliser des situations plus proches de ce qui semble se produire dans la réalité. [Bhattacharya \*et al.\* \[2018\]](#) et [Westmacott et Smallman \[1970\]](#) montrent en effet le rôle très important de la présence de gaz dans la cinétique de décroissance de cavités sous irradiation. [Millett \*et al.\* \[2011b\]](#) donne un exemple de modèle champ de phase qui prend en compte la présence de gaz dissous dans la matrice.

Toujours dans ce contexte de l'étude des matériaux irradiés, il semble qu'il serait pertinent que notre modèle rende compte d'un champ de concentration en interstitiels en plus de celui des lacunes. Les temps de diffusion des interstitiels étant de plusieurs ordres de grandeur plus faibles que ceux des lacunes, nous pourrions envisager l'hypothèse de leur évolution quasi statique par rapport à celles des lacunes. Nous pourrions ainsi tirer parti de notre algorithmique efficace pour calculer le champ de concentration en interstitiels d'une manière similaire au calcul du champ de concentration en lacunes dans notre modèle. De même, nous n'avons pas introduit de mécanismes de nucléation de cavités qui pourrait être pris en compte quantitativement en suivant par exemple la stratégie proposée dans [Bronchart \*et al.\* \[2008\]](#).

S'agissant de l'étude de la cinétique d'évolution de pores dans le CMSX-4 sous HIP, une perspective intéressante, déjà annoncée en fin de chapitre 4, serait de simuler la décroissance d'un pore de taille micrométrique dans un LAB de manière à reproduire la situation expérimentale du comblement des pores dans le CMSX-4 sous HIP. Nous connaissons déjà le type de simulation à réaliser. L'utilisation de notre modèle dans ce cadre est particulièrement appropriée, comme nous l'avons déjà montré. Nous pensons qu'il serait dommage de ne pas réaliser les simulations de ce processus critique encore mal compris.

Finalement, nous n'avons montré dans ces travaux de thèse que des simulations 2D de montée de dislocation. Dans cette situation, des énergies de cœur élevées et non représentatives ont été considérées afin de garantir que les profils diffus du champ de phase (appelé  $\phi$  dans le manuscrit) au niveau des cœurs des dislocations restent proches des profils attendus. A deux dimensions, cet aspect ne modifie pas la cinétique d'évolution des dislocations car les cœurs sont ponctuels et leurs énergies ne peuvent donc que rester constante durant leur mouvement. A trois dimensions en revanche, les dipôles deviennent des boucles et la contribution énergétique totale des cœurs devient proportionnelle à la taille de leurs contours. En considérant des contributions énergétiques de cœur élevées, les boucles de dislocations évoluent ainsi naturellement sous l'effet d'une force motrice qui est alors fortement surestimée. Les cinétiques d'évolution des dislocations s'en trouvent affectées d'une façon qui est physiquement injustifiée. Or il serait particulièrement intéressant d'approfondir notre étude à trois dimensions afin de pouvoir espérer donner des analyses quantitatives sur les interactions entre montées de boucles de dislocations et cavités par diffusion de lacunes. Pour remédier à ce problème, une alternative intéressante au modèle que nous avons proposé serait de considérer un couplage dit "KKS", issu des initiales des noms des trois concepteurs de cette formulation [Kim *et al.*, 1999], qui repose notamment sur une définition du champ de concentration en lacunes construite comme l'interpolation de champs de concentration virtuels de lacunes définis pour chacune des phases (plaquette de dislocation ou matrice). L'intérêt de cette formulation est de traiter de manière séparée les énergies de Gibbs des différentes phases et de rendre indépendant l'énergie de cœur d'une dislocation vis à vis du champ de concentration en lacune. Dans ce cas, nous nous attendons à ce que le profil diffus du champ de phase au niveau des cœurs des dislocations corresponde à celui que nous attendons sans qu'il soit nécessaire d'augmenter de façon irréaliste les valeurs d'énergie de cœur. En outre, Nous pensons que l'utilisation d'une formulation KKS nous permettrait de limiter voire d'enlever les lacunes présentes dans les cavités, dont nous avons discuté au [chapitre 3](#).



## ANNEXE

### A

# RELATIONS ENTRE PARAMÈTRES CHAMP DE PHASE ET GRANDEURS PHYSIQUES

## Fonctionnelle d'énergie libre

Nous considérons le système multi-phasique dans lequel un champ  $\phi$  prend des valeurs entières dans chacune des phases. La fonctionnelle d'énergie  $\mathcal{F}$  qui caractérise ce système s'écrit, au plus bas ordre :

$$\mathcal{F}(\phi, \nabla\phi) = \int_V f(\phi, \nabla\phi) dV = \int_V \left( A w(\phi) + \frac{B}{2} |\nabla\phi|^2 \right) dV, \quad (\text{A.1})$$

où  $w(\phi)$  est un potentiel qui décrit le paysage énergétique. Il est pondéré par  $A$ , la hauteur de la barrière d'énergie entre deux minima, soit deux états permis de  $\phi$ . Le terme de gradient permet l'existence d'interface diffuses. Le terme  $B$  en facteur a donc la dimension d'une énergie par unité de longueur. Sans perdre en généralité nous restreignons le domaine d'étude au cas unidimensionnel. L'équation (A.1) s'écrit alors :

$$\mathcal{F}(\phi, \phi') = \int_x f(\phi, \phi') dx = \int_x \left( A w(\phi) + \frac{B}{2} (\phi')^2 \right) dx \quad (\text{A.2})$$

où  $\phi'$  désigne la dérivée par rapport à la coordonnée  $x$ .



## Profil d'équilibre et largeur d'interface

### Largeur d'interface

À l'équilibre, la dérivée fonctionnelle de  $\mathcal{F}$  par rapport à  $\phi$  s'annule. Nous appelons  $\phi_0$  le profil d'équilibre :

$$\left. \frac{\delta \mathcal{F}(\phi, \phi')}{\delta \phi} \right|_{\phi_0} = 0 = \left. \frac{\partial f(\phi, \phi')}{\partial \phi} \right|_{\phi_0} - \frac{d}{dx} \left. \frac{\partial f(\phi, \phi')}{\partial \phi'} \right|_{\phi_0} \quad (\text{A.3})$$

$$= A \left. \frac{dw(\phi)}{d\phi} \right|_{\phi_0} - B \phi_0'' \quad (\text{A.4})$$

$$= \frac{d}{d\phi} \left[ A w(\phi) - \frac{B}{2} (\phi')^2 \right] \Big|_{\phi_0} \quad (\text{A.5})$$

L'équilibre thermodynamique du système est caractérisé par :

$$A w(\phi_0) - \frac{B}{2} (\phi_0')^2 = C \quad (\text{A.6})$$

où  $C$  est une constante. Nous considérons désormais une interface à l'équilibre thermodynamique en  $x = 0$  et telle que  $\phi_0(x \rightarrow +\infty) = n \in \mathbb{N}^*$  et  $\phi_0'(x \rightarrow +\infty) = 0$  :

$$A w(\phi_0(x \rightarrow +\infty)) - \frac{B}{2} (\phi_0'(x \rightarrow +\infty))^2 = C \quad (\text{A.7})$$

soit

$$A w(n) = C \quad (\text{A.8})$$

En injectant ce résultat dans l'équation (A.6), nous obtenons l'équation suivante :

$$A(w(\phi_0) - w(n)) = \frac{B}{2} (\phi_0')^2 \quad (\text{A.9})$$

soit

$$\sqrt{w(\phi) - w(n)} = \xi \frac{d\phi}{dx} \quad \text{où} \quad \xi = \sqrt{\frac{B}{2A}} \quad (\text{A.10})$$

Cette équation différentielle vérifiée par le profil d'équilibre  $\phi_0$  fait naturellement apparaître une longueur caractéristique de l'interface :

$$\xi = \sqrt{\frac{B}{2A}} \quad (\text{A.11})$$

### Profils d'équilibre

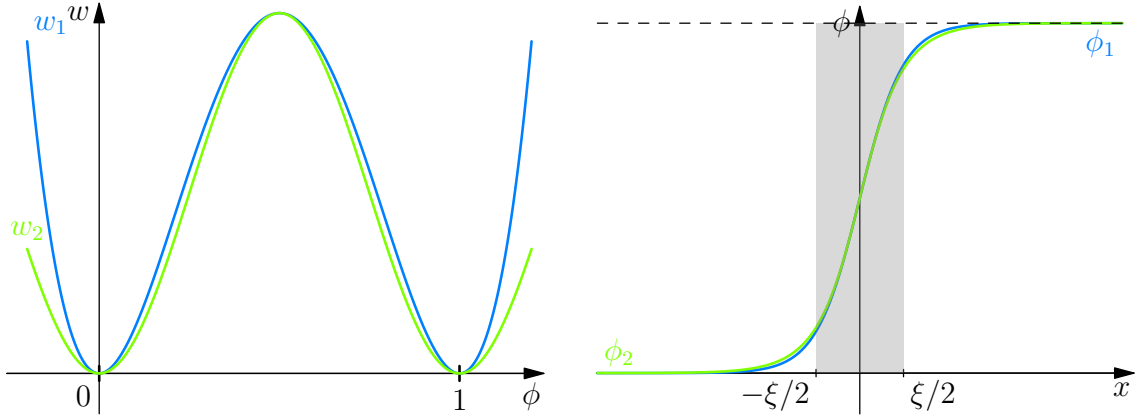
Nous donnons ici les profils d'équilibre d'une interface unidimensionnelle, selon différents paysages énergétiques  $w(\phi)$ . Dans les deux cas étudiés,  $\xi$  est la largeur d'interface précédemment trouvée. Les tracés des différentes fonctions étudiés sont montrés [figure A.1](#).

- Cas où  $w_1(\phi) = 16\phi^2(1 - \phi)^2$ , soit un paysage énergétique possédant deux minima en aux valeurs 0 et 1 et permettant par exemple de discriminer deux phases. Dans le cadre de nos travaux de thèse, c'est cette fonction qui est utilisée pour décrire la présence d'un pore.

$$\phi_1(x) = \frac{1}{2} \left( \tanh \left( \frac{2x}{\xi} \right) + 1 \right) \quad (\text{A.12})$$

- Cas où  $w_2(\phi) = (1 - \cos(2\pi\phi))/2 = \sin^2(\pi\phi)$ , soit un paysage énergétique aux minima multiples  $\in \mathbb{Z}$  et permettant de décrire des systèmes multi-phasés où  $\phi = n$  dans la phase  $n \in \mathbb{Z}$ . Dans le cadre de nos travaux de thèse, c'est cette fonction qui permet de décrire un empilement de dislocations.

$$\phi_2(x) = \frac{2}{\pi} \arctan\left(\exp\left(\frac{\pi x}{\xi}\right)\right) \quad (\text{A.13})$$



(a) Tracés des fonctions  $w_1(\phi) = 16\phi^2(1-\phi)^2$  et  $w_2(\phi) = (1 - \cos(2\pi\phi))/2$ .

(b) Profils d'équilibre correspondants.

FIGURE A.1 – Tracés des paysages énergétiques et des profils d'équilibre correspondants.

## Énergie d'interface

Nous reprenons le cas de l'interface à l'équilibre traité précédemment. L'énergie d'interface répond à la définition suivante :

$$\gamma = \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ A \left( w(\phi) - w(n) \right) + \frac{B}{2} (\phi')^2 \right\} dx \quad (\text{A.14})$$

Nous injectons successivement [équations \(A.9\)](#) et [\(A.10\)](#) dans l'intégrale et nous obtenons l'équation suivante :

$$\begin{aligned} \gamma &= 2A \int_{-\infty}^{+\infty} \left( w(\phi) - w(n) \right) dx \\ &= 2A \int_{\phi(-\infty)}^n \left( w(\phi) - w(n) \right) \left( \frac{d\phi}{dx} \right)^{-1} d\phi \\ &= 2A\xi \int_{\phi(-\infty)}^n \sqrt{w(\phi) - w(n)} d\phi \\ &= 2A\sqrt{\frac{B}{2A}} \int_{\phi(-\infty)}^n \sqrt{w(\phi) - w(n)} d\phi \\ &= \sqrt{2AB} \int_{\phi(-\infty)}^n \sqrt{w(\phi) - w(n)} d\phi \end{aligned}$$

L'énergie d'interface s'écrit donc comme suit :

$$\gamma = c_w \sqrt{2AB} \quad \text{avec} \quad c_w = \int_{\phi(-\infty)}^n \sqrt{w(\phi) - w(n)} \, d\phi \quad (\text{A.15})$$

Dans le cas d'un système biphasé où l'interface rend compte d'un profil de  $\phi$  qui passe de  $\phi = 0$  dans la phase 1 et  $\phi = +1$  dans la phase 2, soit  $w_1(\phi) = 16\phi^2(1 - \phi)^2$  comme définit précédemment, le facteur  $c_{w_1}$  vaut :

$$c_{w_1} = \int_0^1 \sqrt{w_1(\phi)} \, d\phi = \frac{2}{3} \quad (\text{A.16})$$

Dans le cas d'un système multiphasé où l'interface rend compte d'un profil de  $\phi$  qui sépare des valeurs consécutives de  $\phi = n$  appartenant aux phases  $n \in \mathbb{Z}$ , soit  $w_2(\phi) = (1 - \cos(2\pi\phi))/2$  comme définit précédemment, le facteur  $c_{w_2}$  vaut :

$$c_{w_2} = \int_n^{n+1} \sqrt{w_2(\phi)} \, d\phi = \frac{2}{\pi} \quad (\text{A.17})$$

#### Remarque

Les raisonnements que nous avons faits ici et les résultats qui en découlent expliquent les définitions données pour les densités d'énergie libre au [chapitre 2](#).

ANNEXE

B

PARAMÈTRES DES MATÉRIAUX ÉTUDIÉS

Température $T$	1561 K
Paramètre de maille $a$	0.368 nm
Vecteur de Burgers $b$	2.6 Å
Volume atomique $\Omega$	12.5 Å <sup>3</sup>
Énergie de surface $\gamma_v$	1.2 J.m <sup>-2</sup>
coefficients élastiques $C_{11}, C_{12}, C_{44}$	185, 154.9, 69.4 GPa
Énergie de formation d'une lacune $E_f$	1.79 eV
Énergie de migration des lacunes $E_m$	1.04 eV
facteur pré-exponentiel $D_0$	$0.92 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$
Coefficient de diffusion des lacunes $D_v$	$4.33 \cdot 10^{-8} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$
Mobilité des lacunes $M$	$4.17 \cdot 10^{-23} \text{ kg}^{-1}$
Concentration d'équilibre des lacunes $c_0$	$1.66 \cdot 10^{-6}$
Longueur capillaire $d_0$	$1.16 \cdot 10^{-15} \text{ m}$
Pression appliqué $p$	103 MPa

TABLEAU B.1 – CMSX-4 sous HIP [Epishin *et al.*, 2018; Epishin et Link, 2004; Hirth *et al.*, 1983; Ehrhart *et al.*, 1991]

vecteur de Burgers $b$	2.85 Å
coefficients élastiques $C_{11}, C_{12}, C_{44}$	108, 61, 29 GPa
coefficient de Lamé $\lambda$	59 GPa
coefficient de Lamé $\mu$	26 GPa
Énergie de formation d'une lacune $E_f$	0.67 eV
Énergie de migration des lacunes $E_m$	0.61 eV
facteur pré-exponentiel $D_0$	$1.51 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$
volume atomique $\Omega$	$16.4 \text{ Å}^3$
énergie de cœur de la dislocation $\Gamma_d$	$1 \text{ eV} \cdot \text{Å}^{-1} (0.76 \mu b^2)$
Volume de dilatation $V^*$	$-0.38 \Omega$

TABLEAU B.2 – Aluminium [Jacquelin, 2018; Geslin, 2013; Hirth *et al.*, 1983; Ehrhart *et al.*, 1991]

Température $T$	1750 K
Paramètre de maille $a$	0.316 nm
Volume atomique $\Omega$	$16 \text{ Å}^3$
Énergie de surface $\gamma_v$	$3.265 \text{ J} \cdot \text{m}^{-2}$
coefficients élastiques $C_{11}, C_{12}, C_{44}$	527, 205, 161 GPa
Énergie de formation d'une lacune $E_f$	3.65 eV
Énergie de migration des lacunes $E_m$	1.78 eV
facteur pré-exponentiel $D_0$	$4 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$
Coefficient de diffusion des lacunes $D_v$	$2.99 \cdot 10^{-11} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$
Concentration d'équilibre des lacunes $c_0$	$3.08 \cdot 10^{-11}$
Longueur capillaire $d_0$	$6.66 \cdot 10^{-20} \text{ m}$

TABLEAU B.3 – Tungsten à 1750K [Rovelli *et al.*, 2017; Hirth *et al.*, 1983; Ehrhart *et al.*, 1991]

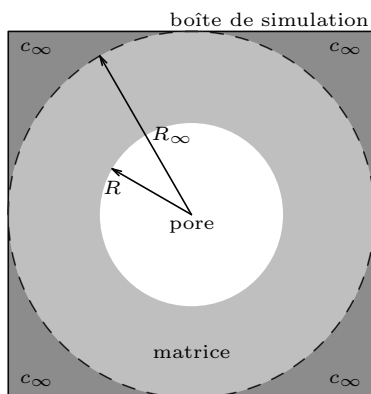
## ANNEXE

### C

# CHOIX DES PARAMÈTRES NUMÉRIQUES POUR LA FERMETURE DE PORE

Nous fixons le coefficient cinétique  $\tilde{L}_\eta = 1$ . Nous choisissons  $D$ ,  $\Delta\tilde{t}$  et le critère de convergence du point fixe  $\|dc/d\tilde{t}\|_\infty$  de manière à

- avoir le moins de lacunes dans le pore, soit  $D$  le plus grand possible (voir [chapitre 3](#)),
- être le plus proche possible de l'analyse asymptotique (voir [chapitre 3](#)),
- être le plus efficace possible en terme de coût de calcul.



pas de grille $d$	2.6 Å
largeur d'interface $w_p$	17.3 nm
Concentration à l'infini $c_\infty$	$1.56 \cdot 10^{-6} (0.94c_0)$
Rayon initial du pore $R_0$	4.16 nm
Rayon limite $R_\infty$	8.32 nm

FIGURE C.1 – Schéma de la situation simulée et paramètres utilisés.

Les paramètres matériau utilisés sont ceux de l'alliage CMSX-4 (voir [Annexe B](#)). Nous simulons la fermeture complète d'un pore par sous-saturation de lacunes selon les dispositions données [figure C.1](#).

Nous négligeons les contributions élastiques (pas de contrainte appliquée, contraction induite par la présence de lacunes nulle).

Nous réalisons plusieurs simulations dans lesquelles nous faisons varier successivement le critère de convergence du point fixe sur les lacunes  $\|dc/d\tilde{t}\|_\infty$ , le paramètre  $D$  et le pas de temps  $\Delta\tilde{t}$ . La liste exhaustive des différentes combinaisons étudiées est donnée [tableau C.1](#). Dans ce tableau, nous appelons  $t_0 = d^2/D_v$  le temps de diffusion d'une lacune sur un pixel de notre boîte de simulation. Nous mesurons la vitesse obtenue de la manière suivante. Nous traçons  $R(t)^2/R_0^2$ . Cette courbe est affine par rapport au temps. Nous en calculons la pente, que nous appelons  $-v(s^{-1})$  et qui est donnée en pixel carré par seconde sur la [figure C.4](#). Un intervalle de confiance est associé à la mesure de cette pente (voir [Annexe F](#)). Dans nos figures, les courbes nommées « asympt » correspondent à la vitesse issue de l'analyse asymptotique (voir [chapitre 3](#)). L'exemple de l'analyse de l'influence du critère de convergence du point fixe dans le cas où  $D = 20$  et  $\Delta t = 10^3 t_0$  est donné [figure C.2](#). Pour ce même exemple, la [figure C.3](#) montre l'influence du critère de convergence sur le temps de simulation nécessaire pour atteindre la fermeture complète du pore. Les simulations sont réalisées sur 20 processeurs. Le code est parallélisé en OpenMP.

$D = 10$		$D = 20$		$D = 50$		$D = 100$	
$\Delta t$	$\ dc/dt\ _\infty$	$\Delta t$	$\ dc/dt\ _\infty$	$\Delta t$	$\ dc/dt\ _\infty$	$\Delta t$	$\ dc/dt\ _\infty$
$10^3 t_0$	$5 \cdot 10^{-5}$	$10^3 t_0$	$5 \cdot 10^{-5}$	$10^2 t_0$	$5 \cdot 10^{-5}$	$10 t_0$	$5 \cdot 10^{-5}$
	$1 \cdot 10^{-4}$		$1 \cdot 10^{-4}$		$1 \cdot 10^{-4}$		$1 \cdot 10^{-4}$
	$5 \cdot 10^{-3}$		$5 \cdot 10^{-3}$		$5 \cdot 10^{-3}$		$5 \cdot 10^{-3}$
	$1 \cdot 10^{-3}$		$1 \cdot 10^{-3}$		$1 \cdot 10^{-3}$		$1 \cdot 10^{-3}$
$10^4 t_0$	$5 \cdot 10^{-5}$	$10^4 t_0$	$5 \cdot 10^{-5}$	$10^3 t_0$	$5 \cdot 10^{-5}$	$10^2 t_0$	$5 \cdot 10^{-5}$
	$1 \cdot 10^{-4}$		$1 \cdot 10^{-4}$		$1 \cdot 10^{-4}$		$1 \cdot 10^{-4}$
	$5 \cdot 10^{-3}$		$5 \cdot 10^{-3}$		$5 \cdot 10^{-3}$		$5 \cdot 10^{-3}$
	$1 \cdot 10^{-3}$		$1 \cdot 10^{-3}$		$1 \cdot 10^{-3}$		$1 \cdot 10^{-3}$
$10^3 t_0$	$5 \cdot 10^{-5}$	$10^3 t_0$	$5 \cdot 10^{-5}$	$10^3 t_0$	$5 \cdot 10^{-5}$	$10^3 t_0$	$5 \cdot 10^{-5}$
	$1 \cdot 10^{-4}$		$1 \cdot 10^{-4}$		$1 \cdot 10^{-4}$		$1 \cdot 10^{-4}$
	$5 \cdot 10^{-3}$		$5 \cdot 10^{-3}$		$5 \cdot 10^{-3}$		$5 \cdot 10^{-3}$
	$1 \cdot 10^{-3}$		$1 \cdot 10^{-3}$		$1 \cdot 10^{-3}$		$1 \cdot 10^{-3}$

TABLEAU C.1 – Liste exhaustive des combinaisons de paramètres testés.

Les résultats obtenus sont présentés [figure C.4](#). Pour  $D = 100$ ,  $\Delta t = 10 t_0$  et  $\max |dc/d\tilde{t}| < 5 \cdot 10^{-5}$ , la vitesse de fermeture est très proche (écart inférieur au pourcent) de la formule obtenue par l'analyse asymptotique, ce qui montre l'excellent comportement de notre modèle. Au terme de notre étude, nous retenons le jeu de paramètres suivants :

$$D = 10, \Delta t = 10^3 t_0 \text{ et } \|dc/d\tilde{t}\|_\infty = 10^{-3} .$$

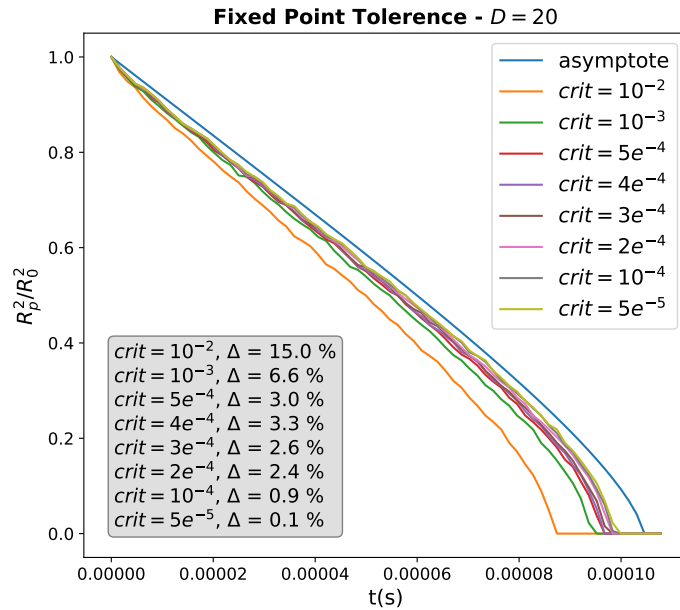


FIGURE C.2 – Étude de l'influence du critère de convergence du point fixe pour  $D = 20$  et  $\Delta \tilde{t} = 10^3 t_0$ . Les courbes  $R(t)^2/R_0^2$  sont tracées pour différents critères de convergence. Les écarts de pente par rapport à l'asymptote sont donnés en pourcent dans l'encarté gris et notés  $\Delta$ .

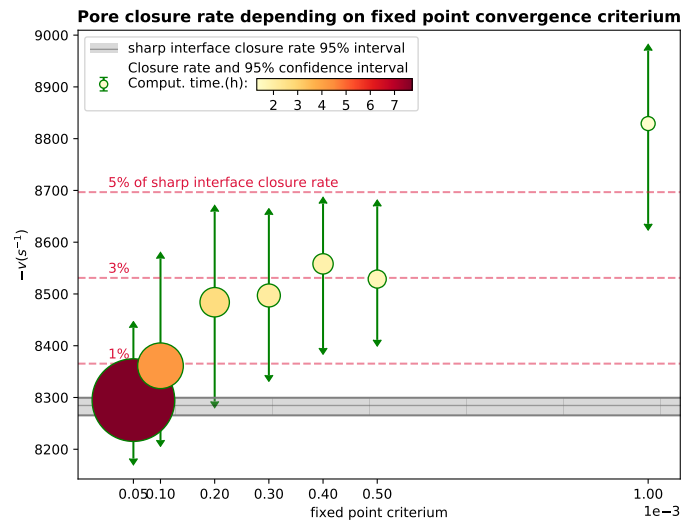


FIGURE C.3 – Étude de l'influence du critère de convergence du point fixe pour  $D = 20$  et  $\Delta t = 10^3 t_0$ . Le temps de calcul associé au choix du critère de convergence est représenté par un cercle qui grossit à mesure que le temps de calcul nécessaire pour simuler une fermeture complète augmente. Une échelle de couleurs est également associée. Sans surprise, plus le critère de convergence est contraignant, plus le calcul est long.



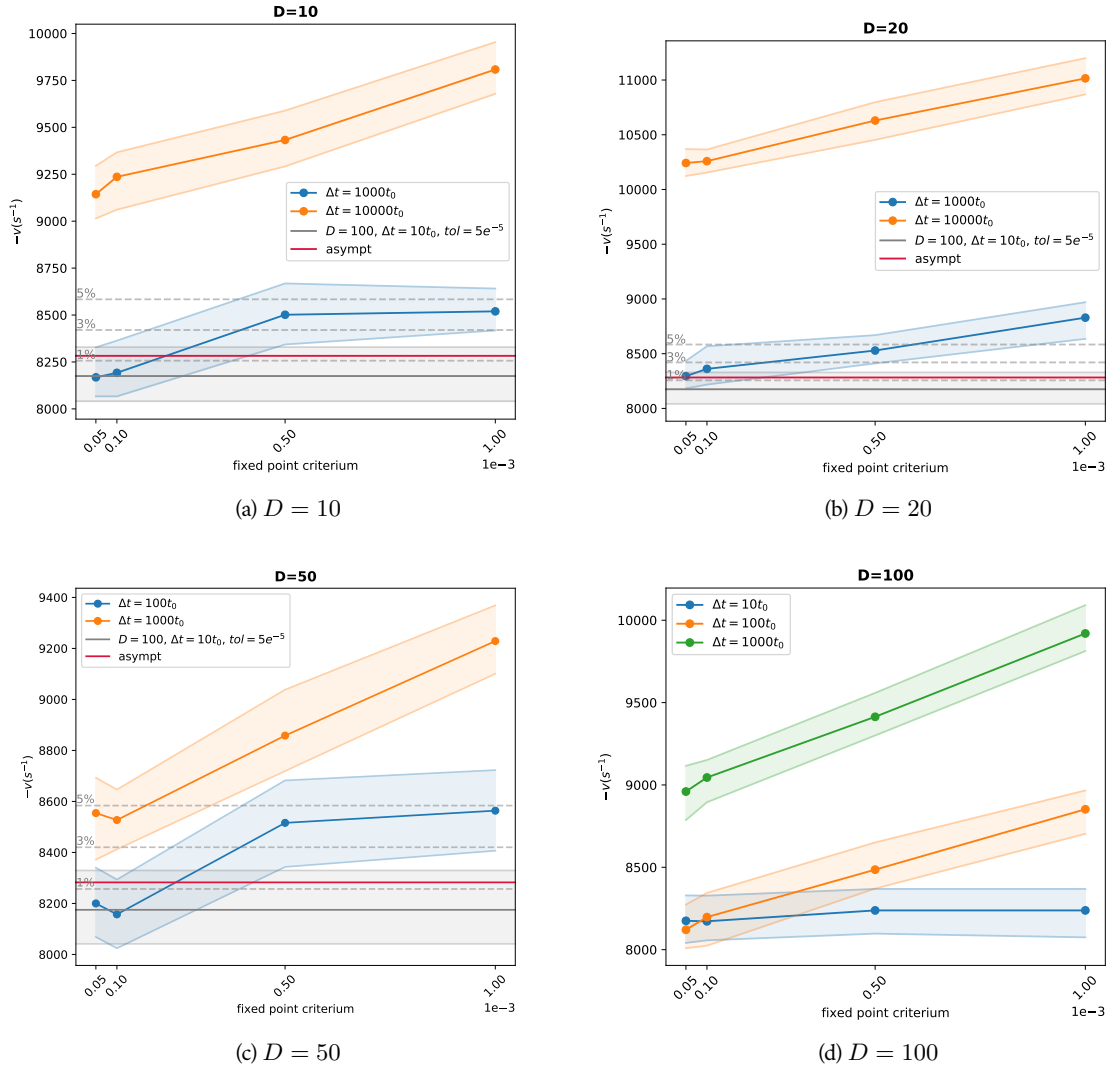


FIGURE C.4 – Vitesses de fermeture du pore  $-v[d^2 \cdot s^{-1}]$  pour les combinaisons  $\{D, \Delta t, \|dc/dt\|_\infty\}$  données dans le [tableau C.1](#). Plus le jeu de paramètres s'approche de l'écriture continue du modèle ( $D \rightarrow \infty, \Delta t \rightarrow 0, \|dc/dt\|_\infty \rightarrow 0$ ) plus la vitesse obtenue est proche de celle issue de l'analyse asymptotique.

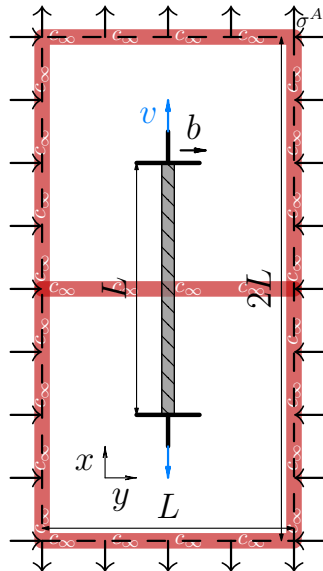
## ANNEXE

### D

## CHOIX DES PARAMÈTRES NUMÉRIQUES POUR LA MONTÉE DE DISLOCATIONS

Nous choisissons  $\tilde{L}_\phi$ ,  $\Delta\tilde{t}$  et le critère de convergence du point fixe  $\|dc/d\tilde{t}\|_\infty$  de manière à

- être le plus proche possible de l'écriture continue du modèle,
- être le plus efficace possible en terme de coût de calcul.



pas de grille $d$	0.285 nm
largeur d'interface $w_d$	1.71 nm
Taille caractéristique $L$	18.2 nm
Contrainte appliquée $\sigma^A$	500 MPa
Sursaturation imposée $c_\infty$	$c_0$

FIGURE D.1 – Montée d'un dipôle de dislocations coins. La bande hachée au centre représente la plaquette de champ  $\phi = 1$ . Une concentration  $c_\infty$  est appliquée aux bords de la boîte de simulation ainsi que sur une bande au milieu. Une contrainte  $\varrho^A = \sigma^A(\mathbf{i} \otimes \mathbf{j} - \mathbf{i} \otimes \mathbf{j})$  est appliquée. Nous négligeons la contraction locale induite par la présence de lacunes.

Nous simulons une montée de dislocation coin, à 2D, selon les dispositions détaillées [figure D.1](#). Les paramètres matériaux utilisés sont ceux de l'aluminium (voir [Annexe B](#)).

Nous réalisons plusieurs simulations dans lesquelles nous faisons varier successivement la mobilité  $\tilde{L}_\phi$ , le critère de convergence du point fixe sur les lacunes  $\|dc/dt\|_\infty$  et  $\Delta\tilde{t}$ . Nous traçons la courbe  $R(t)$  où  $R$  est le rayon de la plaquette champ de phase, soit  $R(t=0) = L/2$  en début de simulation. Après régression (voir [Annexe F](#)) de la partie centrale de cette courbe, pour laquelle la dislocation est considérée au centre du cercle limite de rayon  $\infty = L$ , nous obtenons la vitesse de montée qui est la pente de cette droite. Nous comparons la vitesse obtenue à une vitesse référence obtenue pour l'ensemble de paramètres les plus restrictifs, qui s'approchent le plus de l'écriture continue du modèle, avec l'hypothèse de l'équilibre local, soit  $\Delta\tilde{t} \rightarrow 0$ ,  $\|dc/dt\|_\infty \rightarrow 0$  et  $\tilde{L}_\phi \rightarrow \infty$ . Dans notre cas, nous fixons comme référence la simulation où  $\tilde{L}_\phi = 20$ ,  $\Delta\tilde{t} = 10^{-5}$  et  $\|dc/dt\|_\infty < 10^{-5}$ . Les résultats sont présentées [figure D.2](#). Les vitesses affichées sont exprimées en  $\text{nm.s}^{-1}$ .

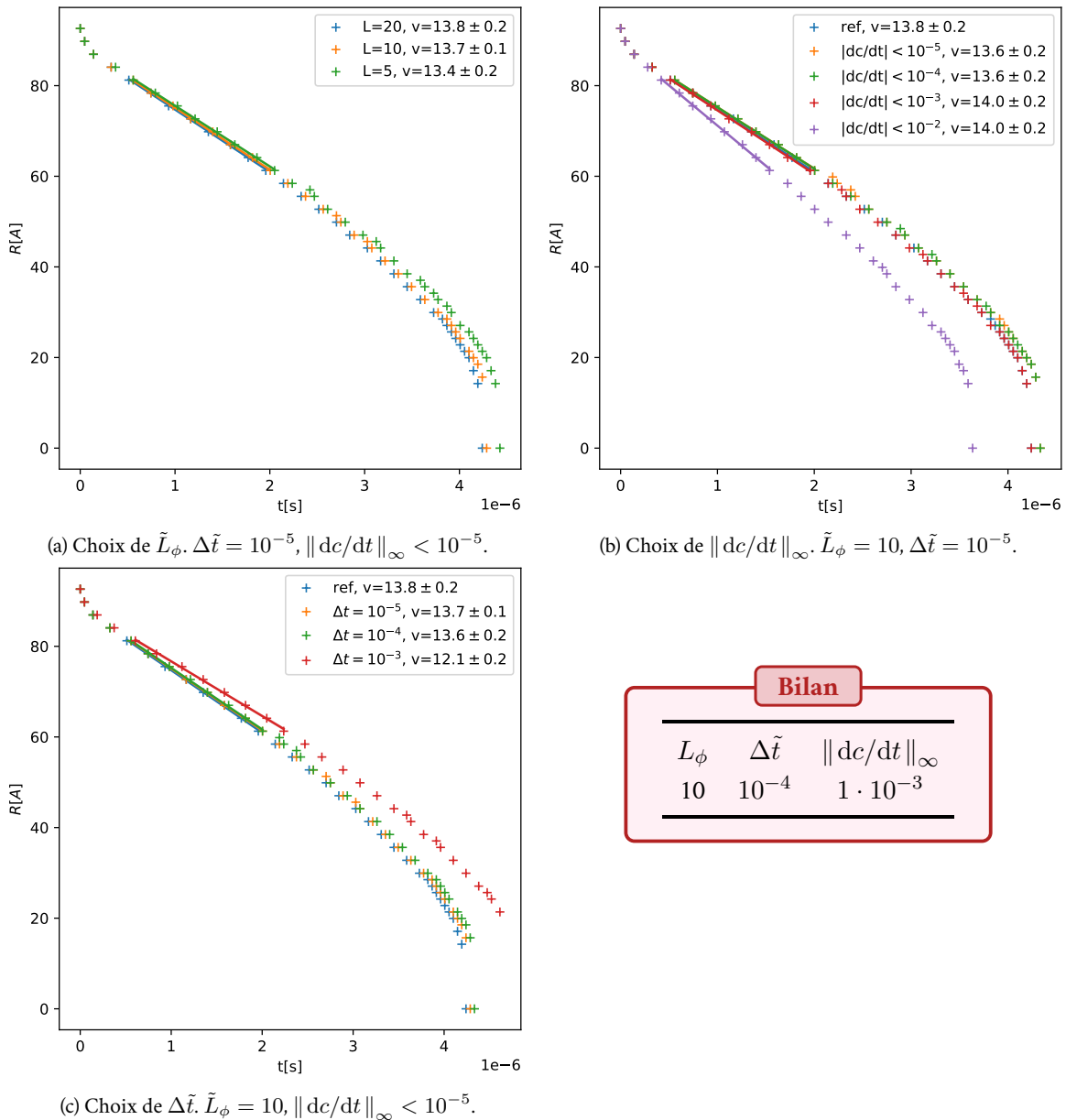


FIGURE D.2 – Courbes  $R(t)$ . Nous fixons dans un premier temps  $\tilde{L}_\phi$  (a), puis  $\Delta\tilde{t}$  (b), et enfin  $\|dc/dt\|_\infty$  (c).

## ANNEXE

# E

## VARIATION DU PAS DE TEMPS $\Delta t$ EN FONCTION DES AUTRES PARAMÈTRES

Nous souhaitons comprendre comment varient les paramètres numériques de notre modèle  $\tilde{L}_\eta$ ,  $\tilde{L}_\phi$  et  $\Delta\tilde{t}$  en fonctions des paramètres physiques adimensionnés donnés en entrée de simulation. Nous raisonnons pour cela sur les ordres de grandeurs des différentes forces motrices. Nous traitons les cas de la fermeture d'un pore et de la montée de dislocation séparément. Nous reprenons la définition du modèle faite de manière exhaustive [chapitre 2](#).

### Fermeture d'un pore par diffusion de lacunes

Nous avons fixé le paramètre  $\tilde{L}_\eta$  au [chapitre 3](#), de manière à imposer l'équilibre local, et ce quels que soient les paramètres physiques considérés :

$$\tilde{L}_\phi = 1. \quad (\text{E.1})$$

Nous reprenons l'équation d'évolution du champ  $\eta$  et nous la discrétisons en temps :

$$\eta(\tilde{t} + \Delta\tilde{t}) = \eta(\tilde{t}) + \Delta\tilde{t} \tilde{L}_\eta \left( \frac{\partial \tilde{f}_{\text{tot}}}{\partial \eta} - \frac{\partial \tilde{f}_{\text{tot}}}{\partial c} \right). \quad (\text{E.2})$$

Nous évaluons les ordres de grandeurs des dérivées partielles :

$$\left| \frac{\partial \tilde{f}_{\text{tot}}}{\partial \eta} \right| \sim \tilde{\gamma}_p \left( \frac{1}{\tilde{w}_p} + \tilde{w}_p \right) + \tilde{C}_{44} |\tilde{\epsilon}| \quad \text{et} \quad \left| \frac{\partial \tilde{f}_{\text{tot}}}{\partial c} \right| \sim 1 + \tilde{C}_{44} |\tilde{\epsilon}^{0,v}| \quad (\text{E.3})$$

La largeur de l'interface adimensionnée  $\tilde{w}_d$  est de l'ordre de l'unité. L'énergie de surface  $\gamma_p$  est de l'ordre de l'unité en  $\text{J.m}^{-2}$ . Avec l'adimensionnement,  $\tilde{\gamma}_p \sim 1/f_0 d$ . Nous considérons que  $|\tilde{\epsilon}|$  et  $|\tilde{\epsilon}^{0,v}|$  sont de

l'ordre de l'unité. Nous aboutissons à l'évaluation suivante :

$$\left| \frac{\partial \tilde{f}_{\text{tot}}}{\partial \eta} \right| \sim \frac{1}{f_0 d} + \frac{C_{44}}{f_0} \quad \text{avec} \quad f_0 = \frac{k_B T}{\Omega} \quad (\text{E.4})$$

En injectant les équations (E.3) et (E.4) dans l'équation (E.2), nous obtenons l'évaluation suivante :

$$\Delta \tilde{t} \tilde{L}_\eta \left( \frac{\partial \tilde{f}_{\text{tot}}}{\partial \eta} - \frac{\partial \tilde{f}_{\text{tot}}}{\partial c} \right) \sim \Delta \tilde{t} \frac{\tilde{L}_\eta}{f_0} \left( \frac{1}{d} + C_{44} \right) \quad (\text{E.5})$$

Nous avons donc :

$$\Delta \tilde{t} \leq \lambda \frac{k_B T}{\tilde{L}_\eta \Omega} \min \left( d, \frac{1}{C_{44}} \right) \quad (\text{E.6})$$

Remarque : en l'absence d'élasticité,  $\Delta \tilde{t} \leq \lambda \frac{k_B T d}{\tilde{L}_\eta \Omega}$

### Valeur de $\lambda$ :

Dans l'alliage CMSX-4, en l'absence d'élasticité, nous avons :

$$T = 1561 \text{ K}$$

$$\Omega = 12.5 \text{ \AA}^3$$

$$d = 2.6 \text{ \AA}$$

Nous avons alors fixé  $\Delta \tilde{t} = 10^{-3}$ . Nous en déduisons donc  $\lambda = 10^{-2}$ .

### Conclusion :

$$\Delta \tilde{t} \leq 10^{-2} \frac{k_B T}{\tilde{L}_\eta \Omega} \min \left( d, \frac{1}{C_{44}} \right) \quad (\text{E.7})$$

## Montée de dislocation

Nous fixons le coefficient cinétique  $\tilde{L}_\phi$  (voir chapitre 3) :

$$\tilde{L}_\phi = \frac{10}{\tilde{b}^2} \quad (\text{E.8})$$

Par un raisonnement analogue à celui que nous venons de faire pour le pore, nous obtenons la relation qui lie la dépendance du pas de temps par rapport aux autres paramètres :

$$\Delta \tilde{t} \leq 10^{-3} \frac{\tilde{b}}{\tilde{C}_{44}} \quad (\text{E.9})$$

## ANNEXE

### F

## MÉTHODE DE RÉGRESSION POLYNOMIALE

Posons  $X = \begin{pmatrix} x_0 \\ \vdots \\ x_{m-1} \end{pmatrix}$  et  $Y = \begin{pmatrix} y_0 \\ \vdots \\ y_{m-1} \end{pmatrix}$  et supposons qu'il existe  $P \in \mathbb{R}_n[X]$  tel que  $Y = P(X)$ .

Estimons  $P$  par  $\hat{P}$  avec la méthode des moindres carrés.

Ce problème peut être ré-écrit en un problème linéaire de la façon suivante :

Posons  $X_{bis} = \begin{pmatrix} x_0^n & \dots & 1 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{m-1}^n & \dots & 1 \end{pmatrix}$ . On a donc  $Y = P \cdot X_{bis}^T$ . On cherche  $\hat{P}$  estimateur de  $P$ .

La fonction `polyfit()` de `numpy` présente nativement dans `python` se charge de réaliser la régression selon la méthode des moindres carrés et nous retourne  $\hat{P}$  ainsi qu'une matrice de covariance des différents coefficients polynomiaux. Notons  $A$  cette matrice carrée symétrique de taille  $n + 1$ .

$$\hat{P} = \begin{pmatrix} \hat{p}_0 \\ \vdots \\ \hat{p}_n \end{pmatrix}, A = \begin{pmatrix} \sigma_0^2 & \dots & \text{Cov}(\hat{p}_0, \hat{p}_n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \text{Cov}(\hat{p}_n, \hat{p}_0) & \dots & \sigma_n^2 \end{pmatrix} \text{ où } \sigma_i^2 = \text{Var}(\hat{p}_i).$$

La grandeur qui nous intéresse est la vitesse instantanée et donc la dérivée  $P'$  de  $P$ . Nous voulons en particulier avoir les incertitudes associés à ces vitesses.

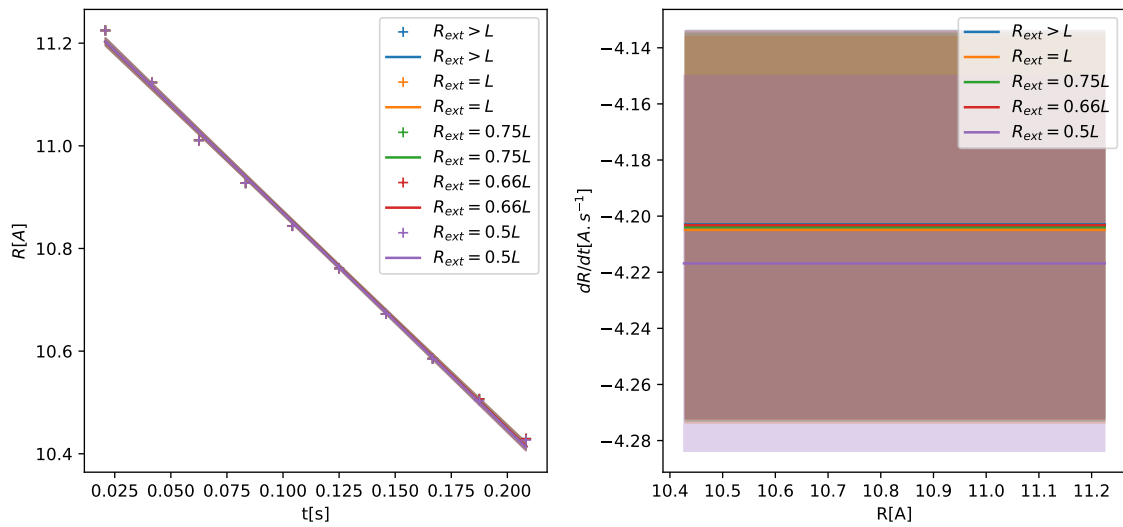
Nous définissons donc pour cela  $A' = \begin{pmatrix} n^2\sigma_0^2 & \dots & n\text{Cov}(\hat{p}_0, \hat{p}_{n-1}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ n\text{Cov}(\hat{p}_{n-1}, \hat{p}_0) & \dots & \sigma_{n-1}^2 \end{pmatrix}$  de taille  $n$ .

Nous définissons également  $X'_{bis} = \begin{pmatrix} x_0^{n-1} & \dots & 1 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{m-1}^{n-1} & \dots & 1 \end{pmatrix}$  et  $\hat{P}' = \begin{pmatrix} \hat{p}_0 \\ \vdots \\ \hat{p}_{n-1} \end{pmatrix}$ .

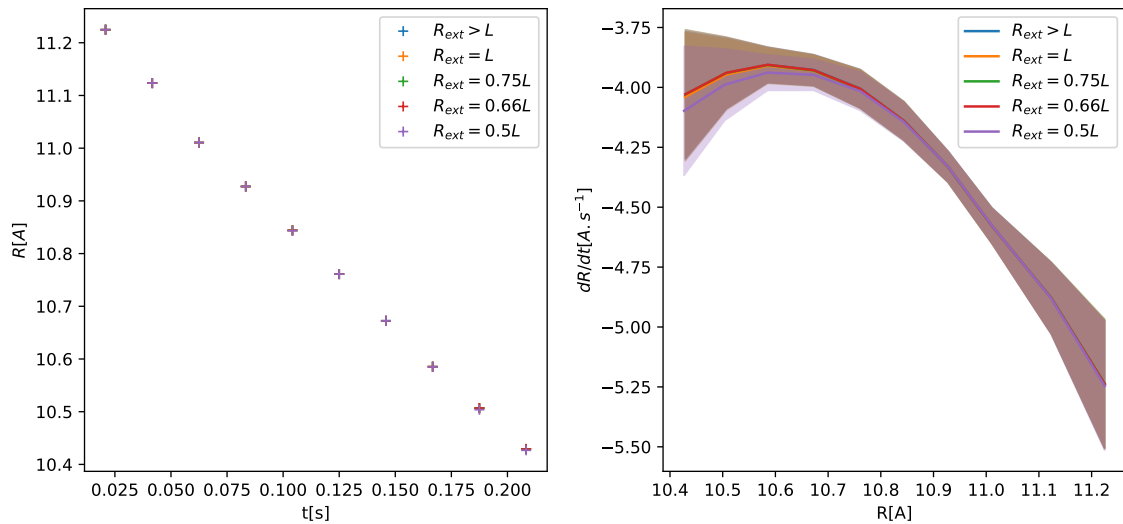
Les valeurs estimées des vitesses instantanées sont donc données par  $\hat{Y}' = \hat{P}' \cdot X'_{bis}{}^T$ .

L'estimateur de la dispersion autour de cette valeur est donné par  $\text{Var}(\hat{Y}') = \text{diag}(X'_{bis} \cdot A' \cdot X'_{bis}{}^T)$ .

Des exemples sont donnés [figure F.1](#).



(a) régression linéaire.



(b) régression polynomiale d'ordre 3.

FIGURE F.1 – Régressions à différents ordres pour un jeu de données  $R = f(t)$ . La bande d'incertitude correspond à  $\pm\sigma$ .

## BIBLIOGRAPHIE

- AHMED, K. et EL-AZAB, A. (2020). Phase-field modeling of microstructure evolution in nuclear materials. *Handbook of Materials Modeling : Applications : Current and Emerging Materials*, pages 2313–2334. 15
- ALLEN, S. M. et CAHN, J. W. (1979). A microscopic theory for antiphase boundary motion and its application to antiphase domain coarsening. *Acta metallurgica*, 27(6):1085–1095. 16
- AREIAS, P. M. et BELYTSCHKO, T. (2005). Analysis of three-dimensional crack initiation and propagation using the extended finite element method. *International journal for numerical methods in engineering*, 63(5):760–788. 13, 14
- ARSENIS, A., CAI, W., TANG, M., RHEE, M., OPPELSTRUP, T., HOMMES, G., PIERCE, T. G. et BULATOV, V. V. (2007). Enabling strain hardening simulations with dislocation dynamics. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 15(6):553. 12
- ATKINSON, H. et DAVIES, S. (2000). Fundamental aspects of hot isostatic pressing : an overview. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 31(12):2981–3000. 106
- BAKÓ, B., GROMA, I., GYÖRGYI, G. et ZIMÁNYI, G. (2006). Dislocation patterning : the role of climb in meso-scale simulations. *Computational materials science*, 38(1):22–28. 11
- BALBUENA, J., CATURLA, M. J., MARTINEZ, E., ANDREONI, W. et YIP, S. (2018). Kinetic monte carlo algorithms for nuclear materials applications. In *Handbook of Materials Modeling : Applications : Current and Emerging Materials*, pages 1–22. Springer. 8
- BARBU, A., BECQUART, C., BOCQUET, J., DALLA TORRE, J. et DOMAIN, C. (2005). Comparison between three complementary approaches to simulate ‘large’ fluence irradiation : application to electron irradiation of thin foils. *Philosophical Magazine*, 85(4-7):541–547. 10
- BATOZ, J.-L. et DHATT, G. (1990). *Modélisation des structures par éléments finis : Solides élastiques*. Presses Université Laval. 13



- BELYTSCHKO, T., GRACIE, R. et VENTURA, G. (2009). A review of extended/generalized finite element methods for material modeling. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 17(4): 043001. 14
- BERTHIER, F., BRAEMS, I., MARAS, E., CREUZE, J. et LEGRAND, B. (2010). Extending cluster dynamics to concentrated and disordered alloys : The linear-chain case. *Acta materialia*, 58(7):2387–2398. 9
- BERTIN, N., UPADHYAY, M., PRADALIER, C. et CAPOLUNGO, L. (2015). A fft-based formulation for efficient mechanical fields computation in isotropic and anisotropic periodic discrete dislocation dynamics. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 23(6):065009. 12
- BHATTACHARYA, A., MESLIN, E., HENRY, J., BARBU, A., POISSONNET, S. et DÉCAMPS, B. (2016). Effect of chromium on void swelling in ion irradiated high purity fe–cr alloys. *Acta Materialia*, 108:241–251. 4
- BHATTACHARYA, A., MESLIN, E., HENRY, J., DÉCAMPS, B. et BARBU, A. (2018). Dramatic reduction of void swelling by helium in ion-irradiated high purity  $\alpha$ -iron. *Materials Research Letters*, 6(7):372–377. 4, 103, 110
- BINER, S. B. (2017). *Programming phase-field modeling*. Springer. 15
- BORTZ, A. B., KALOS, M. H. et LEBOWITZ, J. L. (1975). A new algorithm for monte carlo simulation of ising spin systems. *Journal of Computational Physics*, 17(1):10–18. 10
- BOURDIN, B., FRANCFORT, G. A. et MARIGO, J.-J. (2000). Numerical experiments in revisited brittle fracture. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 48(4):797–826. 15
- BOUSSINOT, G. (2007). *Etude du vieillissement des superalliages à base nickel par la méthode de champs de phase*. Thèse de doctorat, Paris 6. 59, 62
- BOUSSINOT, G., LE BOUAR, Y. et FINEL, A. (2010). Phase-field simulations with inhomogeneous elasticity : Comparison with an atomic-scale method and application to superalloys. *Acta Materialia*, 58(12): 4170–4181. 37
- BRAILSFORD, A. et BULLOUGH, R. (1981). The theory of sink strengths. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, 302(1465):87–137. 9
- BRAILSFORD, A., MATTHEWS, J. et BULLOUGH, R. (1979). The effect of recombination on sink strengths in the rate theory of void-swelling. *Journal of Nuclear Materials*, 79(1):1–13. 9
- BRONCHART, Q., LE BOUAR, Y. et FINEL, A. (2008). New coarse-grained derivation of a phase field model for precipitation. *Physical review letters*, 100(1):015702. 15, 17, 110
- CAHN, J. W. et HILLIARD, J. E. (1958). Free energy of a nonuniform system. i. interfacial free energy. *The Journal of chemical physics*, 28(2):258–267. 16
- CAHN, R. et HAASEN, P. (1983). Physical metallurgy, chapter 30. *Elsevier Science Publishers*, 3:1886. 106

- CAILLARD, D. et MARTIN, J.-L. (2003). *Thermally activated mechanisms in crystal plasticity*. Elsevier. 23
- CARPENTIER, D. (2018). *Simulation de la cinétique d'absorption des défauts ponctuels par les dislocations et amas de défauts*. Thèse de doctorat, Université Paris-Saclay (ComUE). 10
- CHEN, L.-Q. (2002). Phase-field models for microstructure evolution. *Annual review of materials research*, 32(1):113–140. 14
- CLOUET, E., BARBU, A., LAÉ, L. et MARTIN, G. (2005). Precipitation kinetics of al3zr and al3sc in aluminum alloys modeled with cluster dynamics. *Acta Materialia*, 53(8):2313–2325. 8, 9
- COTTURA, M., LE BOUAR, Y., APPOLAIRE, B. et FINEL, A. (2015). Role of elastic inhomogeneity in the development of cuboidal microstructures in ni-based superalloys. *Acta Materialia*, 94:15–25. 37
- DEGEITER, M. (2019). *Étude numérique de la dynamique des défauts d'alignement des précipités  $\gamma'$  dans les superalliages monocristallins à base de nickel*. Thèse de doctorat, Université de Lorraine. 37
- DEGEITER, M., LE BOUAR, Y., APPOLAIRE, B., PERRUT, M. et FINEL, A. (2020). Instabilities in the periodic arrangement of elastically interacting precipitates in nickel-base superalloys. *Acta Materialia*, 187: 41–50. 37
- DEVINCRE, B., MADEC, R., MONNET, G., QUEYREAU, S., GATTI, R. et KUBIN, L. (2011). Modeling crystal plasticity with dislocation dynamics simulations : The 'micromegas' code. *Mechanics of Nano-objects*, pages 81–100. 12
- DHATT, G. et TOUZOT, G. (1984). *The finite method displayed*. JOHN WILEY & SONS, INC., 605 THIRD AVE., NEW YORK, NY 10158, USA, 1984, 550. 13
- DOMAIN, C., BECQUART, C. et MALERBA, L. (2004). Simulation of radiation damage in fe alloys : an object kinetic monte carlo approach. *Journal of Nuclear Materials*, 335(1):121–145. 10
- DOMAIN, C. et BECQUART, C. S. (2020). Object kinetic monte carlo (okmc) : a coarse-grained approach to radiation damage. *Handbook of Materials Modeling : Methods : Theory and Modeling*, pages 1287–1312. 3, 8, 10, 11
- DUNDURS, J. (1969). Elastic interaction of dislocations with inhomogeneities. 100
- DUNDURS, J. et HETE'NYI, M. (1961). The Elastic Plane With a Circular Insert, Loaded by a Radial Force. *Journal of Applied Mechanics*, 28(1):103–111. 100
- DUNDURS, J. et MURA, T. (1964). Interaction between an edge dislocation and a circular inclusion. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 12(3):177–189. 100
- EDELIN, G. et POIRIER, J. (1973). Etude de la montée des dislocations au moyen d'expériences de fluage par diffusion dans le magnésium : Ii. mesure de la vitesse de montée. *Philosophical Magazine*, 28(6): 1211–1223. 23
- EHRHART, P., JUNG, P., SCHULTZ, H. et ULLMAIER, H. (1991). Landolt-bornstein, new series iii/25. *Atomic defects in metals* Á Al. Springer, Berlin, pages 211–223. 20, 35, 117, 118

- EMMERICH, H. (2008). Advances of and by phase-field modelling in condensed-matter physics. *Advances in Physics*, 57(1):1–87. 14
- EON, L. (2022). *Modélisation multi-physique de la propagation d'une fissure courte dans un matériau ductile sollicité en fatigue*. Thèse de doctorat, Université Paris-Saclay. 11
- EPISHIN, A., FEDELICH, B., LINK, T., FELDMANN, T. et SVETLOV, I. L. (2013a). Pore annihilation in a single-crystal nickel-base superalloy during hot isostatic pressing : Experiment and modelling. *Materials Science and Engineering : A*, 586:342–349. 4, 13, 14, 106
- EPISHIN, A. et LINK, T. (2004). Mechanisms of high-temperature creep of nickel-based superalloys under low applied stresses. *Philosophical Magazine*, 84(19):1979–2000. 117
- EPISHIN, A., LINK, T., SVETLOV, I. L., NOLZE, G., NEUMANN, R. S. et LUCAS, H. (2013b). Mechanism of porosity growth during homogenisation in single crystal nickel-based superalloys. *International journal of materials research*, 104(8):776–782. 106
- EPISHIN, A. I., BOKSTEIN, B. S., SVETLOV, I. L., FEDELICH, B., FELDMANN, T., LE BOUAR, Y., RUFFINI, A., FINEL, A., VIGUIER, B. et POQUILLON, D. (2018). A vacancy model of pore annihilation during hot isostatic pressing of single crystals of nickel-base superalloys. *Inorganic Materials : Applied Research*, 9(1):57–65. 41, 53, 55, 76, 106, 107, 117
- EPISHIN, A. I., LINK, T., FEDELICH, B., SVETLOV, I. L. et GOLUBOVSKIY, E. R. (2014). Hot isostatic pressing of single-crystal nickel-base superalloys : Mechanism of pore closure and effect on mechanical properties. In *MATEC Web of Conferences*, volume 14, page 08003. EDP Sciences. 4, 106
- FINEL, A., LE BOUAR, Y., DABAS, B., APPOLAIRE, B., YAMADA, Y. et MOHRI, T. (2018). Sharp phase field method. *Physical review letters*, 121(2):025501. 15, 39, 53
- FINEL, A., LE BOUAR, Y., GAUBERT, A. et SALMAN, U. (2010). Phase field methods : microstructures, mechanical properties and complexity. *Comptes Rendus Physique*, 11(3-4):245–256. 15
- FULLAGAR, K., BROOMFIELD, R., HULANDS, M., HARRIS, K., ERICKSON, G. et SIKKINGA, S. (1996). Aero engine test experience with cmsx-4® alloy single-crystal turbine blades. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 118(CONF-940626-). 3
- GENTILS, A. et CABET, C. (2019). Investigating radiation damage in nuclear energy materials using jannus multiple ion beams. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B : Beam Interactions with Materials and Atoms*, 447:107–112. 4
- GESLIN, P.-A. (2013). *Contribution à la modélisation champ de phase des dislocations*. Thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie-Paris VI. 22, 35, 38, 41, 58, 65, 66, 69, 71, 118
- GESLIN, P.-A., APPOLAIRE, B. et FINEL, A. (2014a). Investigation of coherency loss by prismatic punching with a nonlinear elastic model. *Acta materialia*, 71:80–88. 23
- GESLIN, P.-A., APPOLAIRE, B. et FINEL, A. (2014b). A phase field model for dislocation climb. *Applied Physics Letters*, 104(1):011903. 20, 23, 26, 27, 30, 31, 38, 39, 65, 69

- GESLIN, P.-A., APPOLAIRE, B. et FINEL, A. (2015). Multiscale theory of dislocation climb. *Physical review letters*, 115(26):265501. [12](#), [15](#), [16](#), [20](#), [23](#), [53](#), [69](#)
- GHONIEM, N. (2012). Dislocation dynamics. *Comprehensive Nuclear Materials*, 1:433–453. [11](#)
- GHONIEM, N. et SHARAFAT, S. (1980). A numerical solution to the fokker-planck equation describing the evolution of the interstitial loop microstructure during irradiation. *Journal of Nuclear Materials*, 92(1):121–135. [10](#)
- GHONIEM, N. M. et AMODEO, R. (1988). *Computer simulaltion of dislocation pattern formation*, volume 3. Trans Tech Publ. [11](#)
- GILLESPIE, D. T. (1976). A general method for numerically simulating the stochastic time evolution of coupled chemical reactions. *Journal of computational physics*, 22(4):403–434. [10](#)
- GOLUBOV, S., OVCHARENKO, A., BARASHEV, A. et SINGH, B. (2001). Grouping method for the approximate solution of a kinetic equation describing the evolution of point-defect clusters. *Philosophical Magazine A*, 81(3):643–658. [10](#)
- GROMA, I., ZAISER, M. et ISPÁNOVITY, P. D. (2016). Dislocation patterning in a two-dimensional continuum theory of dislocations. *Physical Review B*, 93(21):214110. [14](#)
- HETÉNYI, M. et DUNDURS, J. (1962). The elastic plane with a circular insert, loaded by a tangentially directed force. *Journal of Applied Mechanics*, 29(2):362. [100](#)
- HIRTH, J. P., LOTHE, J. et MURA, T. (1983). Theory of dislocations. *Journal of Applied Mechanics*, 50(2):476. [87](#), [117](#), [118](#)
- HU, S. et CHEN, L. (2001). A phase-field model for evolving microstructures with strong elastic inhomogeneity. *Acta materialia*, 49(11):1879–1890. [37](#)
- HU, S. et HENAGER JR, C. H. (2009). Phase-field modeling of void lattice formation under irradiation. *Journal of Nuclear Materials*, 394(2-3):155–159. [17](#), [20](#)
- JACQUELIN, C. (2018). *Nanodéfauts formés sous irradiation aux électrons dans l'aluminium*. Thèse de doctorat, Université Paris Saclay (COMUE). [10](#), [41](#), [76](#), [90](#), [91](#), [92](#), [101](#), [118](#)
- JIANG, S., RACHH, M. et XIANG, Y. (2017). An efficient high order method for dislocation climb in two dimensions. *Multiscale Modeling & Simulation*, 15(1):235–253. [78](#)
- JOURDAN, T. (2015). Influence of dislocation and dislocation loop biases on microstructures simulated by rate equation cluster dynamics. *Journal of Nuclear Materials*, 467:286–301. [9](#)
- JOURDAN, T. (2016). Modélisation des microstructures d'irradiation aux temps longs. [8](#), [10](#)
- JOURDAN, T. (2020). Rate theory : Cluster dynamics, grouping methods, and best practices. *Handbook of Materials Modeling : Applications : Current and Emerging Materials*, pages 2489–2501. [8](#)

- JOURDAN, T. (2021). Enforcing local equilibrium of point defects near sinks in object kinetic monte carlo simulations. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 29(3):035007. 10
- JOURDAN, T., SOISSON, F., CLOUET, E. et BARBU, A. (2010). Influence of cluster mobility on cu precipitation in  $\alpha$ -fe : A cluster dynamics modeling. *Acta materialia*, 58(9):3400–3405. 8, 9
- KARMA, A. (2001). Phase-field formulation for quantitative modeling of alloy solidification. *Physical review letters*, 87(11):115701. 15
- KE, J., BOYNE, A., WANG, Y. et KAO, C. (2014). Phase field microelasticity model of dislocation climb : Methodology and applications. *Acta materialia*, 79:396–410. 20
- KHACHATURYAN, A. (1983). *Theory of structural transformations in solids*. John Wiley and Sons, New York, NY. 37
- KHACHATURYAN, A., SEMENOVSKAYA, S. et TSAKALAKOS, T. (1995). Elastic strain energy of inhomogeneous solids. *Physical Review B*, 52(22):15909. 37
- KIM, S. G., KIM, W. T. et SUZUKI, T. (1999). Phase-field model for binary alloys. *Physical review e*, 60(6):7186. 15, 111
- KORZECZEK, L. (2017). *Modélisation mésoscopique en 3D par le modèle Discret-Continu de la stabilité des fissures courtes dans les métaux CFC*. Thèse de doctorat, Université Paris-Saclay (ComUE). 11
- KOTOMIN, E. et KUZOVKOV, V. (1992). Phenomenological kinetics of frenkel defect recombination and accumulation in ionic solids. *Reports on Progress in Physics*, 55(12):2079. 9
- LANDAU, L. D., LIFŠIC, E. M., LIFSHITZ, E. M., KOSEVICH, A. M. et PITAEVSKII, L. P. (1986). *Theory of elasticity : volume 7*, volume 7. Elsevier. 49
- LANORE, J.-M. (1974). Simulation de l'évolution des défauts dans un reseau par la methode de monte-carlo. *Radiation Effects and Defects in Solids*, 22(3):153–162. 10
- LEPINOUX, J. (2006). Contribution of matrix frustration to the free energy of cluster distributions in binary alloys. *Philosophical magazine*, 86(32):5053–5082. 9
- LEPINOUX, J. (2009). Modelling precipitation in binary alloys by cluster dynamics. *Acta materialia*, 57(4):1086–1094. 9
- LEPINOUX, J. et KUBIN, L. (1987). Dynamic organization of dislocation structures : A simulation. *Scr. Metall.;(United States)*, 21(6). 11
- LIM, A., HAATAJA, M., CAI, W. et SROLOVITZ, D. (2012). Stress-driven migration of simple low-angle mixed grain boundaries. *Acta materialia*, 60(3):1395–1407. 11
- LIM, A., SROLOVITZ, D. et HAATAJA, M. (2009). Low-angle grain boundary migration in the presence of extrinsic dislocations. *Acta materialia*, 57(17):5013–5022. 11

- LUBARDA, V., SCHNEIDER, M., KALANTAR, D., REMINGTON, B. et MEYERS, M. (2004). Void growth by dislocation emission. *Acta Materialia*, 52(6):1397–1408. 100, 101
- MACGINNIS, M., CHU, H., YOUSSEF, G., WU, K. W., MACHADO, A. W. et MOON, W. (2014). The effects of micro-implant assisted rapid palatal expansion (marpe) on the nasomaxillary complex—a finite element method (fem) analysis. *Progress in orthodontics*, 15(1):1–15. 14
- MCELFRESH, C., CUI, Y., DUDAREV, S. L., PO, G. et MARIAN, J. (2021). Discrete stochastic model of point defect-dislocation interaction for simulating dislocation climb. *International Journal of Plasticity*, 136:102848. 11, 12, 13
- MELENK, J. M. (1995). *On generalized finite element methods*. Thèse de doctorat, research directed by Dept. of Mathematics. University of Maryland at College Park. 14
- MICHEL, J., MOULINEC, H. et SUQUET, P. (2001). A computational scheme for linear and non-linear composites with arbitrary phase contrast. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 52(1-2):139–160. 37
- MILLETT, P. C., EL-AZAB, A., ROKKAM, S., TONKS, M. et WOLF, D. (2011a). Phase-field simulation of irradiated metals : Part i : Void kinetics. *Computational materials science*, 50(3):949–959. 17, 20, 103
- MILLETT, P. C., EL-AZAB, A. et WOLF, D. (2011b). Phase-field simulation of irradiated metals : Part ii : Gas bubble kinetics. *Computational Materials Science*, 50(3):960–970. 20, 103, 110
- MIROLD, P. et BINDER, K. (1977). Theory for the initial stages of grain growth and unmixing kinetics of binary alloys. *Acta Metallurgica*, 25(12):1435–1444. 9
- MOELANS, N., BLANPAIN, B. et WOLLANTS, P. (2008). An introduction to phase-field modeling of microstructure evolution. *Calphad*, 32(2):268–294. 14
- MOLADJE, G. F. B., THUINET, L., BECQUART, C. S. et LEGRIS, A. (2020a). A phase field model for dislocation climb under irradiation : Formalism and applications to pure bcc iron and ferritic alloys. *International Journal of Plasticity*, 134:102810. 20
- MOLADJE, G. F. B., THUINET, L., DOMAIN, C., BECQUART, C. S. et LEGRIS, A. (2020b). Phase-field calculations of sink strength in al, ni, and fe : A detailed study of elastic effects. *Computational Materials Science*, 183:109905. 23
- MOLL, S., JOURDAN, T. et LEFAIX-JEULAND, H. (2013). Direct observation of interstitial dislocation loop coarsening in  $\alpha$ -iron. *Physical review letters*, 111(1):015503. 8
- MOULINEC, H. et SUQUET, P. (1995). A fft-based numerical method for computing the mechanical properties of composites from images of their microstructures. In *IUTAM symposium on microstructure-property interactions in composite materials*, pages 235–246. Springer. 37
- MUNJIZA, A. et JOHN, N. (2002). Mesh size sensitivity of the combined fem/dem fracture and fragmentation algorithms. *Engineering Fracture Mechanics*, 69(2):281–295. 14



- MURA, T. (1968). The continuum theory of dislocations, advances in materials research 3. 12
- MURA, T. (1987). *Micromechanics of defects in solids*. Martinus Nijhoff Publishers. 21
- NABARRO, F. (1951). Cxxii. the synthesis of elastic dislocation fields. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 42(334):1224–1231. 20
- NICHOLS, F. (1978). On the estimation of sink-absorption terms in reaction-rate-theory analysis of radiation damage. *Journal of Nuclear Materials*, 75(1):32–41. 9
- ORTIZ, C., CATURLA, M., FU, C. et WILLAIME, F. (2007). He diffusion in irradiated  $\alpha$ -Fe : An ab-initio-based rate theory model. *Physical review B*, 75(10):100102. 8
- PARIS, F., CANAS, J. et CAÑAS, J. (1997). *Boundary element method : fundamentals and applications*. Oxford University Press, USA. 78
- PEACH, M. et KOEHLER, J. (1950). The forces exerted on dislocations and the stress fields produced by them. *Physical Review*, 80(3):436. 12
- PEDREGOSA, F., VAROQUAUX, G., GRAMFORT, A., MICHEL, V., THIRION, B., GRISEL, O., BLONDEL, M., PRETTENHOFER, P., WEISS, R., DUBOURG, V., VANDERPLAS, J., PASSOS, A., COURNAPEAU, D., BRUCHER, M., PERROT, M. et DUCHESNAY, E. (2011). Scikit-learn : Machine learning in Python. *Journal of Machine Learning Research*, 12:2825–2830. 92
- PROVATAS, N. et ELDER, K. (2011). *Phase-field methods in materials science and engineering*. John Wiley & Sons. 15
- QIN, R. et BHADESHIA, H. (2010). Phase field method. *Materials science and technology*, 26(7):803–811. 15
- READ, W. T. et SHOCKLEY, W. (1950). Dislocation models of crystal grain boundaries. *Physical review*, 78(3):275. 55
- REISS, H. (1950). The kinetics of phase transitions in binary systems. *The Journal of Chemical Physics*, 18(6):840–848. 9
- ROKKAM, S., EL-AZAB, A., MILLETT, P. et WOLF, D. (2009). Phase field modeling of void nucleation and growth in irradiated metals. *Modelling and simulation in materials science and engineering*, 17(6): 064002. 17, 18, 19, 20, 28, 38, 39, 56, 62
- ROUCHETTE, H., THUINET, L., LEGRIS, A., AMBARD, A. et DOMAIN, C. (2014). Quantitative phase field model for dislocation sink strength calculations. *Computational materials science*, 88:50–60. 23
- ROUCHETTE, H., THUINET, L., LEGRIS, A., AMBARD, A. et DOMAIN, C. (2015). Numerical evaluation of dislocation loop sink strengths : A phase-field approach. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B : Beam Interactions with Materials and Atoms*, 352:31–35. 23

- ROVELLI, I., DUDAREV, S. et SUTTON, A. (2017). Non-local model for diffusion-mediated dislocation climb and cavity growth. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 103:121–141. [53](#), [54](#), [77](#), [79](#), [80](#), [82](#), [84](#), [87](#), [90](#), [99](#), [101](#), [118](#)
- RUFFINI, A. et FINEL, A. (2015). Phase-field model coupling cracks and dislocations at finite strain. *Acta Materialia*, 92:197–208. [38](#)
- RUFFINI, A., LE BOUAR, Y. et FINEL, A. (2017). Three-dimensional phase-field model of dislocations for a heterogeneous face-centered cubic crystal. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 105:95–115. [38](#)
- RUFFINI, A., LE BOUAR, Y., FINEL, A., EPISHIN, A., FEDELICH, B., FELDMANN, T., VIGUIER, B. et POQUILLON, D. (2022). Dislocations interacting with a pore in an elastically anisotropic single crystal nickel-base superalloy during hot isostatic pressing. *Computational materials science*, 204:111118. [76](#), [107](#)
- SCHROEDER, K. et DETTMANN, K. (1975). Diffusion reactions in long range potentials. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, 22(4):343–350. [9](#)
- SCHWARZ, K. (1999). Simulation of dislocations on the mesoscopic scale. i. methods and examples. *Journal of Applied Physics*, 85(1):108–119. [11](#)
- SCHWARZ, K. (2003). Local rules for approximating strong dislocation interactions in discrete dislocation dynamics. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 11(4):609. [11](#)
- SEIDMAN, D. N. et BALLUFFI, R. (1965). Sources of thermally generated vacancies in single-crystal and polycrystalline gold. *Physical Review*, 139(6A):A1824. [23](#)
- SELLERI, S., VINCETTI, L., CUCINOTTA, A. et ZOBOLI, M. (2001). Complex fem modal solver of optical waveguides with pml boundary conditions. *Optical and Quantum Electronics*, 33(4):359–371. [14](#)
- SINGER-LOGINOVA, I. et SINGER, H. (2008). The phase field technique for modeling multiphase materials. *Reports on progress in physics*, 71(10):106501. [14](#)
- SOISSON, F., BECQUART, C., CASTIN, N., DOMAIN, C., MALERBA, L. et VINCENT, E. (2010). Atomistic kinetic monte carlo studies of microchemical evolutions driven by diffusion processes under irradiation. *Journal of Nuclear Materials*, 406(1):55–67. [12](#)
- STEINBACH, I. (2009). Phase-field models in materials science. *Modelling and simulation in materials science and engineering*, 17(7):073001. [14](#)
- STRAALSUND, J., POWELL, R. et CHIN, B. (1982). An overview of neutron irradiation effects in lmfbr materials. *Journal of Nuclear Materials*, 108. [4](#)
- THORNTON, K., ÅGREN, J. et VOORHEES, P. W. (2003). Modelling the evolution of phase boundaries in solids at the meso- and nano-scales. *Acta materialia*, 51(19):5675–5710. [14](#)
- TOURRET, D., LIU, H. et LLORCA, J. (2022). Phase-field modeling of microstructure evolution : Recent applications, perspectives and challenges. *Progress in Materials Science*, 123:100810. [15](#)



- VALDENNAIRE, P.-L. (2016). *Plasticité cristalline : Equations de transport et densités de dislocations*. Thèse de doctorat, Paris Sciences et Lettres (ComUE). 38
- VALDENNAIRE, P.-L., LE BOUAR, Y., APPOLAIRE, B. et FINEL, A. (2016). Density-based crystal plasticity : From the discrete to the continuum. *Physical Review B*, 93(21):214111. 14
- VOLTERRA, V. (1907). Sur l'équilibre des corps élastiques multiplement connexes. *Annales scientifiques de l'École Normale Supérieure*, 24:401–517. 12
- VOTER, A. F. (2007). Introduction to the kinetic monte carlo method. *In Radiation effects in solids*, pages 1–23. Springer. 10
- WAITE, T. (1958). General theory of bimolecular reaction rates in solids and liquids. *The Journal of Chemical Physics*, 28(1):103–106. 9
- WANG, H. et LESAR, R. (1995). O (n) algorithm for dislocation dynamics. *Philosophical Magazine A*, 71(1):149–164. 12
- WANG, N., ROKKAM, S., HOCHRAINER, T., PERNICE, M. et EL-AZAB, A. (2014). Asymptotic and uncertainty analyses of a phase field model for void formation under irradiation. *Computational materials science*, 89:165–175. 20
- WESTMACOTT, K. et SMALLMAN, R. (1970). The formation, stability and effect on yield stress of cavities in neutron-irradiated aluminium. *Materials Science and Engineering*, 5(6):325–333. 103, 110
- WEYGAND, D., FRIEDMAN, L., Van der GIESSEN, E. et NEEDLEMAN, A. (2002). Aspects of boundary-value problem solutions with three-dimensional dislocation dynamics. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 10(4):437. 11
- WILLOT, F. (2015). Fourier-based schemes for computing the mechanical response of composites with accurate local fields. *Comptes Rendus Mécanique*, 343(3):232–245. 37, 38
- XU, D., WIRTH, B. D., LI, M. et KIRK, M. A. (2012). Defect microstructural evolution in ion irradiated metallic nanofoils : Kinetic monte carlo simulation versus cluster dynamics modeling and in situ transmission electron microscopy experiments. *Applied Physics Letters*, 101(10):101905. 8
- YU, H.-C. et LU, W. (2005). Dynamics of the self-assembly of nanovoids and nanobubbles in solids. *Acta Materialia*, 53(6):1799–1807. 17, 18
- ZIENKIEWICZ, O., KELLY, D. et BETTESS, P. (1977). The coupling of the finite element method and boundary solution procedures. *International journal for numerical methods in engineering*, 11(2):355–375. 13

## Résumé

---

La compréhension des mécanismes fondamentaux à l'origine de l'évolution des défauts cristallins tels que les lacunes, les dislocations ou encore les cavités, ainsi que de leurs interactions mutuelles, est essentielle pour prédire le comportement des matériaux métalliques en conditions extrêmes. Les couplages multi-physiques en jeu sont cependant difficiles à identifier, tant par des simulations qu'à l'aide de dispositifs expérimentaux. Nous proposons ainsi un modèle champ de phase pour décrire les interactions entre lacunes, cavités et dislocations. Nous présentons dans un premier temps sa construction ainsi que son implémentation numérique, pensée de manière à minimiser les coûts de calculs. Nous détaillons en particulier notre approche originale de la résolution de l'équilibre chimique qui nous permet de simuler des phénomènes mésoscopiques sur les temps longs de la diffusion. Nous validons dans un second temps notre modèle dans le cadre de l'évolution de microstructures qui peuvent être approchées de manière analytique. Enfin, dans une troisième partie, nous étudions le comportement d'une microstructure 2D comportant plusieurs cavités et des dislocations. Nous montrons notamment que la prise en compte des interactions élastiques entre les cavités et les dislocations, généralement négligées dans ce type d'étude, modifie significativement la cinétique d'évolution de la microstructure.

**Mots-clés :** Champ de phase, cavités, dislocations, diffusion, microstructure, ....

## Summary

---

The comprehension of the fundamental mechanisms controlling the evolution and mutual interactions of extended defects such as dislocation and cavities is crucial to understand the behaviour of materials under extreme conditions. Underlying phenomena are hard to capture, either by numerical simulations or by experimental approaches. Therefore, building a complete mathematical formalism which can be efficiently implemented is at stake. In this work we develop a phase-field variational model that couples vacancy diffusion, dislocation climb and pore evolution, with the consideration of elastic interactions. We first present the construction of the model as well as its numerical implementation, including an improved solver for the equation controlling the vacancy field evolution. This drastically decreases the computational time and allows us to tackle diffusion at mesoscopic scales. We then validate our model on microstructures whose evolution can be predicted analytically. We finally present 2D simulation results on the interactions between climbing dislocations and pore assemblies, revealing the role of elastic interactions on the microstructural evolution.

**Mots-clés :** Phase field, dislocations, cavities, diffusion, microstructure, ....