PROPOSITION DE SUJET DE THESE

Th RES 25-3

Pièce 2 : Sujet de thèse

Référence PMT (EOTP) :

001/11/01/01

Lien avec les documents de démarche de recherche :

Ce sujet de thèse s'inscrit dans le cadre du questionnement scientifique formulé dans la question 4 du domaine de la sûreté-sécurité de la stratégie scientifique de l'IRSN : « Comment évaluer de manière réaliste l'impact sur la sûreté des évolutions des caractéristiques des installations sur toute leur durée de vie ? »

Objectif de la thèse en matière d'avancée(s) des connaissances :

Cette thèse se situe dans le cadre des recherches menées à l'IRSN concernant le vieillissement des aciers de cuve dans les réacteurs à eau sous pression. De nombreux changements microstructuraux interviennent dans ces aciers de cuve à cause de l'irradiation. Ces changements représentent la clé pour comprendre et prédire la modification de leurs réponses viscoplastiques et de leurs propriétés à rupture avec l'irradiation (durcissement et fragilisation sous irradiation). Dans ce contexte, l'objectif de ce travail est de proposer un nouveau modèle de comportement plastique à l'échelle du polycristal, capable d'utiliser une loi de comportement plastique cristalline adaptée à un acier de cuve irradié.

Contenu de la thèse :

La cuve contient le cœur du réacteur. Elle est traversée par l'eau refroidissant le cœur, qui est maintenue sous forte pression. Elle constitue ainsi une partie essentielle de la deuxième barrière de sûreté [1]. Un acier bainitique au carbone faiblement allié (16MND5) est utilisé en France dans la fabrication de ces cuves (hors revêtements internes).

De façon générale, le terme « vieillissement » désigne l'ensemble des mécanismes liés au temps qui tendent à faire perdre aux matériels leurs caractéristiques initiales [2]. Parmi les mécanismes de vieillissement se trouvent les effets de l'irradiation.

De nombreux changements microstructuraux interviennent dans ces aciers de cuve à cause de l'irradiation. Ces changements représentent la clé pour comprendre et prédire la modification de leurs réponses viscoplastiques (dont le durcissement) et de leurs propriétés à rupture avec l'irradiation. Des stratégies de modélisation multi-échelles et multi-physiques ont été développées dans plusieurs projets européens [3][4][5][6] avec pour objectif, pour les aciers de cuve, de prédire la ténacité à partir de la microstructure initiale, de la température, des conditions d'irradiation. Dans ces stratégies multi-échelles, la plasticité cristalline représente une étape importante : elle est souvent utilisée pour dériver une loi de comportement plastique équivalente simple (par exemple, isotrope de type J2) en employant diverses méthodes d'homogénéisation pour polycristaux, ainsi que des modèles de comportement cristallin obtenus par dynamique des dislocations ou autres types de simulation aux échelles inférieures. En effet, des progrès importants ont été effectués ces dernières années sur les lois cristallines pour ces aciers irradiés, les rendant en général moins empiriques, mais aussi plus complexes à mettre en œuvre numériquement : de nombreuses variables internes doivent être mises à jour lors de l'intégration de ces lois (par exemple, des densités de dislocations selon les différents systèmes de glissement, des densités de défauts dans différents plans cristallographiques).

Du point de vue de la mécanique de la rupture, la plupart des modèles multi-échelles développés récemment sont inspirés de l'approche locale de Beremin [7]. Un calcul éléments finis est tout d'abord réalisé sur une éprouvette entaillée (de type CT pour Compact Tension) avec le comportement plastique du matériau irradié identifié (loi de comportement plastique simple de type J2 évoquée ci-dessus) afin d'obtenir les champs de contrainte et de déformation dans l'éprouvette. Ce calcul est ensuite chaîné avec un outil de post-traitement qui utilise un modèle

PROPOSITION DE SUJET DE THESE

Th RES 25-3

d'approche locale pour estimer la ténacité (des stratégies différentes ont été récemment proposées, par exemple celle du modèle MIBF [8] incluant trois échelles de modélisation).

Comme énoncé plus haut, l'objectif de ce travail est de proposer un nouveau modèle de comportement plastique à l'échelle du polycristal, capable d'utiliser une loi de comportement plastique cristalline adaptée à un acier de cuve irradié. Du point de vue appliqué, il faudra que le modèle de comportement proposé puisse être directement intégrable dans un logiciel de calcul aux éléments finis, afin d'estimer les champs de contrainte en pointe de fissure.

Dans une thèse précédente (Chaix, 2024, thèse IRSN-AMU-UNLP [9]), une loi de plasticité cristalline à l'échelle du monocristal spécifique pour les aciers de cuve irradiés et à base physique a été considérée. La montée d'échelle, depuis le monocristal jusqu'au polycristal, a ensuite été réalisée par homogénéisation au travers de calculs en champs complets et de calculs en champs moyens. Plusieurs campagnes de calculs en champs complets (méthode à base de transformées de Fourier rapides, FFT, code CraFT développé au CNRS/LMA [10]) ont été réalisées et les résultats ont été confrontés à des résultats expérimentaux (essais de traction notamment [11]). Les approximations en champs moyens ont été obtenues en utilisant des méthodes d'homogénéisation non-linéaires, en homogénéisant de manière découplée les déformations élastiques et plastiques et en employant divers schémas de complexité croissante, tels que les schémas élémentaires de Taylor et Sachs ou les schémas auto-cohérents plus récents basés sur le concept de milieu linéaire de comparaison comme Fully Optimized Second-Order (FOSO) [12][13][14]. Globalement, les résultats obtenus ont montré :

- la pertinence de la loi de plasticité cristalline à base physique retenue pour les aciers de cuve ;
- un bon accord entre les résultats expérimentaux, les simulations en champs complets par FFT et en champs moyens avec la méthode FOSO;
- la robustesse de l'outil de simulation en champs complets par FFT développé avec cette loi de plasticité cristalline particulière ;
- la possibilité d'utiliser un modèle en champs moyens FOSO avec une telle loi de plasticité cristalline complexe et à base physique.

Néanmoins, les modèles en champs moyens obtenus avec FOSO ont montré plusieurs limitations pour leur application en termes :

- de robustesse (problèmes de convergence lorsque la température augmente) ;
- de temps de calcul importants (liés aux difficultés de convergence) ;
- de mauvaise description de la transition élasto-plastique.

Pour des polycristaux en viscoplasticité, des travaux récents ont proposé et entrainé des modèles de réseaux de neurones sur la base d'ensemble de données générées par des calculs en champs complets, ou des calculs en champs moyens [15][16].Les résultats ont montré que les modèles de réseaux de neurones proposés permettent d'améliorer considérablement les temps de calcul, sans perte majeure en termes de précision. Néanmoins, les applications proposées dans ces articles considèrent des lois de plasticité cristalline plus simples que celle utilisée dans la présente thèse pour les aciers de cuve (loi de plasticité cristalline à base physique impliquant un nombre important de variables internes).

La thèse proposée ici vise, en suivant [15][16], à développer et entrainer un réseau de neurones, afin d'obtenir la réponse viscoplastique globale du polycristal en fonction du chargement (intensité, direction et histoire du chargement). La base d'ensemble de données pourrait être générée grâce aux outils et modèles développés dans la thèse de (Chaix, 2024) [9] :

- des calculs en champs complets avec l'outil de simulation par FFT développé avec cette loi de plasticité cristalline complexe et à base physique pour acier de cuve ;
- des calculs en champs moyens avec la méthode FOSO.

D'autres méthodes pourraient être investiguées :

PROPOSITION DE SUJET DE THESE

Th RES 25-3

- celle développée par [17] pour des polycristaux en viscoplasticité, basée sur l'identification, lors du processus d'entrainement du réseau de neurones, de variables internes macroscopiques qui embarquent l'histoire du chargement. Il est important de noter que les variables internes ne sont pas spécifiées a priori, mais déterminées par entraînement à l'aide de données macroscopiques;
- celle des réseaux dits de matériaux, développée récemment pour des matériaux bi-phasés par [18]. Ce type d'approche pourrait être adoptée en utilisant des résultats sur les laminés séquencés de rang N [19].

Les résultats du modèle pourront être comparés à des résultats numériques sur polycristaux (en champs complets par FFT et en champs moyens avec FOSO) et des résultats expérimentaux de traction pour aciers vierges ou irradiés, à différentes températures.

Références :

- [1] BOIRON P. et MONNIER B., « Construction des centrales REP. Equipements primaires », Techniques de l'ingénieur, B 3 270.
- [2] HUTIN J.-P., « Gestion de la durée de vie des centrales nucléaires », Techniques de l'ingénieur, BN 3 307.
- [3] MASSOUD J.-P., BUGAT S., MARINI B., LIDBURY D., VAN DYCK S., « PERFECT Prediction of Irradiation Damage Effects on Reactor Components: A summary », Journal of Nuclear Materials 406 (2010) 2-6.
- [4] BUGAT S., EL GHARIB J., PROIX J.-M., ZEGHADI A., « The toughness module of the PERFECT platform: A predictive tool for the fracture toughness of RPV steels », Journal of Nuclear Materials 406 (2010) 187-192.
- [5] LECLERCQ S., LIDBURY D., VAN DYCK S., MOINEREAU D., ALAMO A., AL MAZOUZI A., « PERFORM 60 -Prediction of the effects of radiation for reactor pressure vessel and in-core materials using multi-scale modelling - 60 years foreseen plant lifetime », Journal of Nuclear Materials 406 (2010) 193-203.
- [6] https://cordis.europa.eu/project/id/661913/fr
- [7] BEREMIN F., PINEAU A., MUDRY F., DEVAUX J.-C., D'ESCATHA Y., LEDERMANN P., « A local criterion for cleavage fracture of a nuclear pressure vessel steel », Metallurgical and Materials Transactions A, 14(11) (1983) 2277-2287.
- [8] FORGET P., MARINI, B., VINCENT, L., « Application of local approach to fracture of an RPV steel: effect of the crystal plasticity on the critical carbide size », Procedia Structural Integrity 2 (2016) 1660-1667.
- [9] CHAIX L., « Modélisation micromécanique du comportement viscoplastique d'un polycristal : application au durcissement d'un acier irradié », Thèse d'Aix-Marseille Université (2024).
- [10] MOULINEC H., SUQUET P., "A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure", Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering (1998), 157 (1-2), pp. 69 - 94.
- [11] CHAIX L., GĂRĂJEU M., IDIART M.I., MONNET G., VINCENT P.-G., "Computational homogenization of a physically-based crystal plasticity law for irradiated bainitic steels", Computational Materials Science (2025) 246, art. no. 113316.
- [12] PONTE CASTAÑEDA P., « Fully optimized second-order variational estimates for the macroscopic response and field statistics in viscoplastic crystalline composites », Proc. R. Soc. A 471: 20150665 (2015).
- [13] SONG D., PONTE CASTAÑEDA P., « Fully optimized second-order homogenization estimates for the macroscopic response and texture evolution of low-symmetry viscoplastic polycrystals », International Journal of Plasticity 110 (2018) 272-293.

PROPOSITION DE SUJET DE THESE

Th RES 25-3

- [14] CHAIX L., GARAJEU M., VINCENT P.-G., MONNET G., IDIART M.I., "Homogenized descriptions for the elastoplastic response of polycrystalline solids with complex hardening laws: Application to neutronirradiated bainitic steels", European Journal of Mechanics, A/Solids (2024), 105, art. no. 105258.
- [15] ALI U., MUHAMMAD W., BRAHME A., SKIBA O., INAL K., Application of artificial neural networks in micromechanics for polycrystalline metals, International Journal of Plasticity (2019) Volume 120, 205-219.
- [16] DAI W., WANG H., GUAN Q., LI D., PENG Y., TOMÉ C. N., "Studying the micromechanical behaviors of a polycrystalline metal by artificial neural networks", Acta Materialia (2021), Volume 214, 117006.
- [17] LIU B., OCEGUEDA E., TRAUTNER M., STUART A. M., BHATTACHARYA K., "Learning macroscopic internal variables and history dependence from microscopic models", Journal of the Mechanics and Physics of Solids (2023), Volume 178, 105329.
- [18] SHIN D., ALBERDI R., LEBENSOHN R.A., DINGREVILLE R., "Deep material network via a quilting strategy: visualization for explainability and recursive training for improved accuracy" (2023), npj Comput Mater 9, 128.
- [19] IDIART M.I., « Modeling the macroscopic behavior of two-phase nonlinear composites by infinite-rank laminates », J. Mech. Phys. Solids 56 (2008) 2599-2617.

Déroulement de la thèse :

Le déroulement prévu de la thèse est le suivant :

1^{ère} année

- Bibliographie sur les réseaux de neurones appliqués à la micromécanique. Si possible, suivi du cours du CISM « Machine Learning for Solid Mechanics » du 29 septembre au 3 octobre.
- 2. Mise au point d'une base d'ensemble de données, obtenues par simulations numériques sur polycristaux (calculs en champs complets et en champs moyens).
- 3. Développement et entrainement d'un réseau de neurones en suivant les approches de [15][16].

2^{ème} année

- 1. Implémentation du modèle dans un programme indépendant.
- 2. Comparaison entre le nouveau modèle, des simulations numériques en champs complets, les modèles en champs moyens et les résultats expérimentaux pour un acier de cuve vierge ou irradié pour une large gamme de températures, taux de déformation et niveaux d'irradiation. « Benchmarking » entre le nouveau modèle et les modèles en champs moyens pour évaluation de l'accélération du calcul (« speed up » obtenu avec les réseaux de neurones par comparaison à FOSO).

<u>3^{ème} année</u>

- 1. Investigation d'une autre méthode plus complexe (par variables internes de type [17], ou par réseau de matériaux de type [18]).
- 2. Rédaction du manuscrit de thèse et préparation de la soutenance.

Moyens expérimentaux, outils de simulation, nécessaires à la réalisation de la thèse :

- Code CraFT, développé au LMA.
- Code d'homogénéisation en viscoplasticité des polycristaux de la thèse de L. Chaix.

PROPOSITION DE SUJET DE THESE

Th RES 25-3

Partenariats envisagés

Identifier les partenaires nécessaires à la réalisation de la thèse.

- LMA : UMR 7031 Aix-Marseille Université (AMU), CNRS et Centrale Méditerranée
- Université Nationale de La Plata (UNLP), Argentine

Intérêt du partenariat - Apport du partenaire

Préciser notamment les moyens techniques (dispositifs expérimentaux, outils de simulations, etc.) qui seront mis à disposition par le partenaire.

- La démarche scientifique d'ensemble met à profit des travaux antérieurs de modélisation et de simulation numérique réalisés sur le thème du vieillissement des aciers de cuve conjointement par l'IRSN, le LMA et l'UNLP : thèse de L. Chaix.
- Outils de simulation (CraFT). Accès aux clusters de calculs du LMA.