

Couplage déterministe/stochastique pour la dynamique d'amas

Pierre TERRIER, Cermics (ENPC)

Manuel ATHENES, CEA/DEN/SRMP

Thomas JOURDAN, CEA/DEN/SRMP

Gilles ADJANOR, EDF R&D, dpt. MMC

Gabriel STOLTZ, Cermics (ENPC)

Mots-clés : dynamique d'amas, processus de saut, processus de Langevin

L'évolution de la microstructure des matériaux sous irradiation ou lors du vieillissement thermique implique des processus complexes (germination, croissance, formation de précipités, etc.) sur des temps longs. La dynamique d'amas (DA) est utilisée pour modéliser l'évolution des amas de défauts. Elle consiste à résoudre un ensemble d'équations différentielles ordinaires (EDOs), chaque EDO décrivant l'évolution de la concentration d'un type de défauts. Le nombre d'équations à résoudre peut devenir très grand et c'est l'une des difficultés principales de la DA que de résoudre efficacement un tel système. Différentes approches permettent de réduire le nombre d'équations à résoudre, soit en approximant le système par une équation plus simple (de type Fokker-Planck) pour tout une classe d'amas [1], soit en résolvant le système de manière stochastique [2]. Les méthodes déterministes sont efficaces lorsqu'il n'y a qu'une seule espèce de défauts (des amas de lacunes par exemple), mais leur résolution devient prohibitive pour des matériaux plus complexes ayant d'autres espèces de défauts (défauts ponctuels, solutés, etc.), car la dimensionnalité de l'équation de Fokker-Planck augmente avec le nombre d'espèces de défauts. Les méthodes stochastiques sont alors plus adaptées à ces cas complexes mais sont limitées du fait d'événements fréquents.

On propose de coupler les méthodes déterministes et stochastiques afin de bénéficier des avantages des deux méthodes. Il s'avère que les petits amas sont responsables des événements fréquents, et nous proposons donc de résoudre l'évolution des concentrations des petits amas de façon déterministe. Les amas de grande taille sont traités de manière stochastique. L'algorithme de couplage est introduit pour un cas de croissance d'amas de lacunes d'un matériau soumis au vieillissement thermique [3]. Pour un amas de taille n , l'équation d'évolution de la concentration C_n est donnée par

$$\frac{dC_n}{dt} = \beta_{n-1}C_{\text{vac}}C_{n-1} - (\beta_nC_{\text{vac}} + \alpha_n)C_n + \alpha_{n+1}C_{n+1}, \quad n \geq 2$$

où α_n et β_n sont respectivement les coefficients d'émissions et d'absorptions d'une lacune par un amas de taille n et C_{vac} est la concentration de mono-lacunes, dont l'évolution dépend de l'ensemble des concentrations C_n ce qui introduit de la non-linéarité. Pour des amas de grande taille, l'ensemble de ces équations peut être approché par une unique équation de Fokker-Planck, cette équation étant liée au processus stochastique, dit processus de Langevin. Traiter de façon stochastique toute une classe d'amas permet ainsi la réduction du nombre d'équations à résoudre, et offre une facilité à paralléliser l'algorithme, réduisant alors le temps d'exécution des simulations.

Références

- [1] T. JOURDAN ET AL., *Efficient simulation of kinetics of radiation induced defects: A cluster dynamics approach*, J. Nucl. Mater., **444** (1), 2014.
- [2] J. MARIAN ET AL., *Stochastic cluster dynamics method for simulations of multispecies irradiation damage accumulation*, J. Nucl. Mater., **415** (1), 2011.
- [3] P. TERRIER ET AL., *Cluster dynamics modelling of materials: a new hybrid deterministic/stochastic coupling approach*, arxiv:1610.02949, 2016.

Pierre TERRIER, Cermics, Ecole des Ponts Paristech, 6-8 avenue Blaise Pascal, 77455 Champs-sur-Marne, France

pierre.terrier@enpc.fr