



HAL
open science

Modèle numérique micro-mécanique d'agrégat polycristallin pour le comportement des combustibles oxydes

Julien Pacull

► **To cite this version:**

Julien Pacull. Modèle numérique micro-mécanique d'agrégat polycristallin pour le comportement des combustibles oxydes. Mécanique des solides [physics.class-ph]. Université de Provence - Aix-Marseille I, 2011. Français. NNT: . tel-00720837

HAL Id: tel-00720837

<https://theses.hal.science/tel-00720837>

Submitted on 25 Jul 2012

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.

UNIVERSITÉ DE PROVENCE - AIX-MARSEILLE I

THÈSE

pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE PROVENCE

Discipline : Mécanique du Solide
École Doctorale Sciences pour l'ingénieur :
Mécanique, Physique, Micro et Nanoélectronique
E.D. numéro 353

Présentée et soutenue publiquement
par

Julien Pacull

Le 04 février 2011

**Modèle numérique micro-mécanique d'agrégat
polycristallin pour le comportement des combustibles
oxydes**

JURY

M. KHÉMAIS SAANOUNI	Professeur des universités, Université de Troyes	Président
M. SAMUEL FOREST	Directeur de recherche, EMP	Rapporteur
M. SYLVAIN LECLERCQ	Ingénieur chercheur, EDF R&D	Rapporteur
M. OLIVIER CASTELNAU	Directeur de recherche, ENSAM Paris	Examineur
M. PIERRE SUQUET	Directeur de recherche, LMA	Examineur
M. BRUNO MICHEL	Ingénieur chercheur, CEA	Examineur
M. OLIVIER DÉBORDES	Professeur des université, ECM	Directeur de thèse
M. MARC MÉDALE	Professeur des universités, IUSTI	Directeur de thèse

Remerciements

Au terme de ces trois années de thèse au sein du Laboratoire de Simulation du comportement des Combustibles du CEA Cadarache, il y a un grand nombre de personnes envers qui je suis redevable, et je tiens avant tout autre chose à les remercier¹.

Je voudrais tout d'abord remercier chacun des membres de mon jury de thèse pour avoir accepté d'évaluer mes travaux. Si la valeur du travail d'un doctorant peut se mesurer à celle de son jury, alors j'ai toutes les raisons de me sentir fier. Merci à Khémaïs Saanouni, de l'université de Troyes, d'avoir présidé ce jury. Samuel Forest de l'Ecole des Mines de Paris et Sylvain Leclercq, ingénieur de recherche chez EDF, ont joué leur rôle de rapporteurs avec un enthousiasme dont je leur suis très reconnaissant. Leur expertise et leurs remarques ont été plus que bienvenues et je les remercie chaleureusement. Merci encore à Olivier Castelnau, de l'ENSAM Paris, qui a participé à ce jury en tant qu'examinateur. Je voudrais remercier plus particulièrement Pierre Suquet du Laboratoire de Mécanique et d'Acoustique à Marseille, qui au-delà de son rôle d'examinateur aura été pendant ces trois ans un interlocuteur de choix en matière de modèles polycristallins.

Je me dois aussi de remercier Marc Médale de l'Université d'Aix-Marseille I et Olivier Débordes du LMA, qui ont dirigé mes travaux de thèse. Leurs compétences en matière de méthodes numériques ont non seulement permis de lever un certain nombre des difficultés rencontrées pendant la thèse, mais ont aussi donné à ce travail une coloration "numérique" qui contribue largement à son intérêt. Au delà de leur seule expertise scientifique, je tiens à les remercier pour leur gentillesse, et pour leur confiance et l'autonomie avec laquelle ils m'ont laissé mener mon travail.

Bruno Michel, ingénieur de recherche au CEA Cadarache, a été mon encadrant et une force motrice sur ce projet de développement d'un modèle polycristallin. Il y a beaucoup à dire sur notre collaboration et les innombrables discussions (trop souvent commencées aux alentours de 16h17 à mon goût, mais bon, personne n'est parfait !) que nous avons eues autour de ce modèle, toujours avec bonne humeur et avec un soucis d'échange basé sur un sain pragmatisme. Réflexion faite, il y a sans doute encore davantage à dire en ce qui concerne ce dont je lui suis redevable, aussi je vais faire court : merci. Beaucoup.

Ma gratitude va aussi à Emmanuel Touron et Renaud Masson, qui m'ont accueillis au CEA Cadarache². Renaud, en particulier, du fait de ses compétences en matière d'homogénéisation et de sa disponibilité, a été un soutien de choix tout au long de la thèse.

1. En fait, cette tâche est de bien des façons la plus monumentale que j'aurai entreprise au cours de cette thèse, et à l'heure où j'écris ces lignes rien ne m'assure que j'en verrai le terme. Pour ceux des lecteurs assez courageux pour accepter de m'y accompagner, je vous conseille de vous armer d'un café bien noir et d'une musique calme, et de vous caler dans votre fauteuil fétiche. Si vous avez la chance de disposer d'une version électronique ce manuscrit, le moment est sans doute bien choisi pour faire appel à la fonction recherche de votre programme pour directement chercher votre nom pour vous assurer que je ne vous ai pas oublié. Dans tous les cas, je vous donne rendez-vous en page 9 pour la suite.

2. Même si dans les faits c'est un peu *moi* qui les ait accueillis au sein du service. J'en profite pour remercier leurs prédécesseurs respectifs, Laurence Brunel et Patrick Obry.

Toute l'équipe du labo m'a réservé un accueil formidable, et je tiens à vous remercier tous, peut-être pas nommément car sinon on risque d'y être encore demain, mais le coeur y est. Dans l'ordre plus ou moins chronologique : merci tout d'abord à Régine, pour sa gentillesse et pour l'aide précieuse qu'elle m'a apporté en particulier à l'approche de la soutenance ; merci à Jérôme, qui m'a donné un goût pour les zones cohésives que j'ai mis à profit à la première occasion venue ; merci à Victor, Solène, Hellie, Lauréline et à tous les occupants du bureau des thésards passés et à venir ; merci à Etienne, Thomas et toute l'équipe latex, qui ne sont pas autant des ayatollahs qu'ils aimeraient à le laisser croire³ et dont les conseils ont souvent été très judicieux, même quand j'ai refusé de les suivre. Bien entendu, je remercie aussi Isabelle, pour son aide sur le calcul des contraintes interfaciales mais aussi et surtout pour sa bonne humeur et son goût vestimentaire sans égal. Merci aussi à Jean-Marie et Laurence, pour leurs idées et les discussions toujours enrichissantes que nous avons eues. Je tiens enfin à remercier Jérôme (et non, je ne t'avais pas oublié!), source inépuisable de conseils et qui m'a été d'une aide précieuse tout au long de la thèse, même maintenant puisque ces remerciements s'inspirent - au moins les meilleures parties - de ceux de sa thèse. Aujourd'hui, je peux le reconnaître : rédiger cette satanée note technique était une bonne idée.

Au cours de ma thèse, j'ai bénéficié de l'aide de deux stagiaires, Son Cao et Audrey, et leur contribution a apporté une valeur ajoutée importante à ce projet dans son ensemble. Je les remercie, en espérant ne pas les avoir trop fait souffrir pendant les quelques mois où nous avons travaillé ensemble. De mon côté j'en garde un souvenir très positif et je vous souhaite le meilleur à tous les deux. Je profite de l'occasion pour saluer Anass, Vincent et Julian, et pour les remercier de leur camaraderie et de leurs conseils.

Cette thèse a été une collaboration entre le CEA Cadarache et le Laboratoire de Mécanique et d'Acoustique à Marseille et je tiens à remercier tous les membres de l'équipe Méthodes Numériques pour leur accueil. Je remercie aussi Ange, Grégory, Farid, Giampiero, François et tous mes camarades thésards du labo. J'ai beaucoup apprécié le temps passé ensemble, et pas seulement parce qu'il s'accompagnait le plus souvent de petits fours et autres douceurs.

J'en viens à une note plus personnelle des remerciements. Pour commencer, je dois exprimer ma gratitude aux biscuits mistral, sans qui rien n'aurait été possible.

Plus sérieusement, je dois bien sûr remercier ma famille et mes proches pour leur soutien. Merci à mon père, pour tout ce qu'il représente pour moi, à commencer par un exemple. Merci à mon frère, pour son amitié et parce qu'il a finalement réussi à retenir l'intitulé exact de mon sujet de thèse au bout de trois ans (et c'est sincère!). Merci à tous ceux qui sont venus me voir à la soutenance et à tous ceux qui n'ont pas pu faire le voyage. Je remercie en particulier Stéphanie, qui, au-delà de tout ce qu'elle m'apporte au quotidien, a bien voulu effectuer les dernières relectures de ce mémoire, et supporter les innombrables répétitions à l'approche de la soutenance. Une nouvelle étape de notre voyage commence maintenant, et je sais qu'à tes côtés elle ne pourra être qu'heureuse. Je ne comptais pas m'en tirer sans un petit mot pour Gidéon alors voilà, je suppose que je peux au moins lui être reconnaissant de ne pas avoir grignoté mon mémoire comme il ronge tout ce qui lui passe sous les quenottes habituellement.

Bien sûr, mon plus grand regret aujourd'hui est que ma mère n'ait pas pu assister à ma soutenance. Je sais que ça la rendait fière et aujourd'hui, malgré la peine, je ressens un peu de cette fierté moi aussi, et avec la fierté une tendresse et une profonde gratitude. Pour toutes ces raisons, je voudrais lui dédier cette thèse.

3. Notez en revanche que je n'ai rien dit concernant la lourdeur légendaire de leur humour, réputation qui pour le coup n'est pas complètement usurpée. Mais rassurez-vous, ça n'enlève rien à l'affection que j'ai pour vous.

*“L’approche multi-échelles : c’est un petit pas pour l’homme,
mais un grand pas pour l’humanité.”
Higuain Barnable.*

Table des matières

I	Contexte - Etat de l'art	19
1	Problématique industrielle	21
1.1	Le réacteur à eau pressurisée	22
1.1.1	Principe de fonctionnement du réacteur	22
1.1.2	Le crayon combustible	24
1.1.3	Régimes de puissance nominal et incidentel	25
1.2	Comportement du combustible UO_2 sous irradiation	27
1.2.1	Réactions de fission et évolution de la microstructure	27
1.2.2	Comportement thermo-mécanique de la pastille et Interaction Pastille-Gaine	28
1.3	Vers la modélisation du combustible : le projet PLEIADES	30
2	Etat de l'art pour la modélisation du comportement de l'UO_2	33
2.1	Cadre de la modélisation	34
2.1.1	Sollicitations thermo-mécaniques recontrées au cours de l'irradiation	34
2.1.2	Essais de caractérisation mécanique du matériau vierge	35
2.1.3	Prise en compte des effets de l'irradiation sur le combustible	37
2.2	Modèles de fluage élémentaires	39
2.2.1	Modèles fluage-diffusion	39
2.2.2	Modèles de fluage dislocations	42
2.2.3	Cartes de mécanismes de déformation	45
2.2.4	Fluage et irradiation	46
2.3	Loi Gatt-Monerie	47
2.3.1	Modélisation du fluage thermique stationnaire	48
2.3.2	Traitement de la porosité	50
2.4	Modélisation du combustible UO_2 en réacteur	50
2.4.1	Modélisation mécanique de l' UO_2 sous irradiation	50
2.4.2	Prise en compte de l'évolution de la microstructure	53
2.4.3	Conclusions : les limites de l'approche multi-échelles	55
II	Modèle d'agrégat polycristallin pour l'UO_2	59
3	Représentation de l'agrégat	61
3.1	Un premier modèle de polycristal : l'approche à champ moyen	62
3.1.1	Formulation auto-cohérente	62
3.1.2	Modélisation de l'agrégat d' UO_2 : vers l'approche à champ complet	64
3.2	Mosaïque de Voronoï	65
3.2.1	Définition	65
3.2.2	Modélisation du polycristal	66

3.2.3	Triangulation de Delaunay	68
3.2.4	Génération et maillage de l'agrégat	68
3.3	Périodicité	73
3.3.1	Homogénéisation périodique	73
3.3.2	Génération d'une mosaïque de Voronoï périodique	73
3.4	Microstructures générées	76
3.4.1	Propriétés morphologiques du modèle polycristallin	76
3.4.2	Propriétés du maillage par éléments finis	78
3.5	Conclusion sur la représentation géométrique du polycristal	78
4	Mécanismes de déformation du combustible	81
4.1	Elasticité de l'agrégat d'UO ₂	82
4.1.1	Elasticité du cristal d'UO ₂	82
4.1.2	Homogénéisation périodique	83
4.1.3	Analyse de l'anisotropie du polycristal d'UO ₂	85
4.1.4	Bilan des résultats obtenus dans le domaine élastique	88
4.2	Première approche pour la plasticité cristalline	88
4.2.1	Mouvements de dislocations dans l'UO ₂	89
4.2.2	Pic de compression et avalanche de dislocations	91
4.2.3	Identification des paramètres du modèle PC _U	95
4.2.4	Analyse des résultats obtenus avec le modèle PC _U	98
4.3	Modélisation du fluage intragranulaire	101
4.3.1	Prise en compte du fluage-diffusion	101
4.3.2	Modification du fluage-dislocations	102
4.3.3	Identification des paramètres du modèle ld ₂	103
4.3.4	Modèles de fluage intragranulaire : bilan	105
4.4	Glissement et décohésion intergranulaire	107
4.4.1	Les joints de grains dans l'UO ₂	107
4.4.2	Modèles de zones cohésives	109
4.4.3	Implémentation dans le modèle d'agrégat	111
4.5	Conclusions sur les mécanismes de déformation du polycristal	114
III	Sensibilité numérique et représentativité du VER	117
5	Première analyse du comportement local du VER	119
5.1	Présentation de la simulation	120
5.1.1	Conditions du calcul	120
5.1.2	Origine des phénomènes de localisation	121
5.1.3	Réponse effective de l'agrégat	122
5.2	Analyse des distributions de contraintes locales	123
5.2.1	Localisation de la contrainte intragranulaire	123
5.2.2	Contraintes aux joints de grains	125
5.3	Conclusions de l'analyse du comportement local du VER	128
5.3.1	Revue des résultats obtenus	128
5.3.2	Problèmes de sensibilité et choix du VER	129

6	Etude de sensibilité au choix du maillage	131
6.1	Plasticité incompressible et éléments finis	132
6.1.1	Blocage volumétrique des éléments	132
6.1.2	Test du poinçon de Prandtl	133
6.1.3	Incompressibilité et effet “checkerboard”	136
6.2	Sensibilité au choix du maillage éléments finis	137
6.2.1	Description de l’étude	137
6.2.2	Sensibilité du comportement macroscopique	139
6.2.3	Comportement intragranulaire	140
6.2.4	Comportement aux joints de grains	143
6.3	Conclusions de l’étude de sensibilité	144
7	Calcul des contraintes intergranulaires	149
7.1	Positionnement du problème	150
7.1.1	Introduction	150
7.1.2	Présentation de l’étude	150
7.2	Méthodes de calcul des contraintes intergranulaires	151
7.2.1	Extrapolation des contraintes aux noeuds	152
7.2.2	Une méthode alternative de calcul des contraintes interfaciales	153
7.2.3	Utilisation d’éléments cohésifs	154
7.2.4	Analyse de la contrainte aux joints de grains par les différentes méthodes	157
7.2.5	Une quatrième méthode de calcul des contraintes interfaciales	160
7.3	Bilan de l’étude : comparaison entre les différentes méthodes	163
IV	Validation du modèle d’agrégat	165
8	Décohésion intergranulaire au cours d’un essai de fluage	167
8.1	Mesures expérimentales de la décohésion	168
8.1.1	Caractérisation des essais	168
8.1.2	Mesures de décohésion intergranulaire	168
8.2	Simulation de l’essai	169
8.2.1	Un premier calcul en l’absence de décohésion	169
8.2.2	Vers la prise en compte de la décohésion intergranulaire	170
8.2.3	Résultats de la simulation	172
8.3	Conclusions	177
8.3.1	Bilan des simulations de décohésion	177
8.3.2	Perspectives pour la modélisation du comportement intergranulaire	178
9	Modélisation d’une rampe de puissance	179
9.1	Positionnement du problème	180
9.1.1	Définition d’un chargement à partir des résultats d’ALCYONE	180
9.1.2	Cas du comportement élastique monocristallin	183
9.2	Comportement effectif du polycristal	184
9.3	Analyse des contraintes locales	186
9.3.1	Pression hydrostatique intragranulaire	187
9.3.2	Comportement intergranulaire	189
9.3.3	Approche micromécanique et couplage multi-physique : bilan	191
	Bibliographie	199

V	Annexes	205
A	Algorithme de tirage des germes	207
B	Orientations cristallines	209
	B.1 Répartition aléatoire	210
	B.2 Orientations équiréparties	211
C	Conditions de périodicité pour le calcul EF	213
	C.1 Ecriture des conditions de périodicité dans le cas général	213
	C.1.1 Position du problème	213
	C.1.2 Utilisation de noeuds fictifs	213
	C.2 Elements de périodicité pour la géométrie irrégulière	214
	C.2.1 Cas 3D	215
	C.3 Comparaison des deux types de géométries du VER	215
D	Validation de la mise en oeuvre d'éléments cohésifs élastiques	217
	Table des figures	224
	Liste des tableaux	225

Principales notations utilisées

Avant de rentrer dans le corps de ce document, nous indiquons ici les principales notations qui seront utilisées par la suite. Par convention, les grandeurs tensorielles sont notées en gras \mathbf{X} par oppositions aux grandeurs scalaires X .

Sigles et Abréviations	
CEA	Commissariat à l’Energie Atomique et aux Energies Alternatives
EDF	Electricité de France
REP	Réacteur à Eau Pressurisée
PLEIADES	Plate-forme Logicielle pour les Eléments Irradiés dans les Assemblages, en Démonstration, en Expérimentation, ou en Service
VER	Volume Elémentaire Représentatif
MHE	Millieu Homogène Equivalent
PC _U	Plasticité Cristalline dans le dioxyde d’Uranium
ld ₂	Loi Diffusion / Dislocations
Tenseurs d’ordre 2 et 4	
\mathbf{C}	Tenseur d’élasticité
\mathbf{E}	Tenseur de déformations effectives
$\mathbf{\Sigma}$	Tenseur de contraintes effectives
$\boldsymbol{\varepsilon}$	Tenseur de déformations locales
$\boldsymbol{\sigma}$	Tenseur de contraintes locales
\mathbf{m}_s	Tenseur d’orientation de Schmid
\mathbf{A}	Matrice d’écrouissage intragranulaire
<i>Suite à la page suivante</i>	

TABLE 1 – Principales notations utilisées dans ce mémoire

Scalars	
μ	Module de cisaillement élastique
G	Module de compressibilité élastique
R	Constante des gaz parfaits
T	Température absolue
D_{vol}	Coefficient d'auto-diffusion volumique
D_{jdG}	Coefficient d'auto-diffusion aux joints de grains
d	taille de grain
ρ	Densité de dislocations
b	norme du vecteur de Burgers
$\dot{\gamma}_s$	Taux de cisaillement dans le système de glissement s
τ_s	Cission résolue dans le système de glissement s
τ_{0s}	Cission critique résolue du système de glissement s
τ_{i_s}	Contrainte interne du système de glissement s
h_{lat}	Paramètre d'écrouissage intragranulaire
c_1, c_2	Paramètres de cinétique des dislocations
P_{hyd}	Pression hydrostatique
σ_{eq}	Contrainte équivalente de Von Mises
Grandeurs définies sur le polycristal	
\overline{X}^g	valeur moyenne par grain de X
$\langle X \rangle^g$	moyenne de l'écart-type intragranulaire de X
\overline{X}^{jdG}	valeur moyenne par joint de grain de X
σ_n	Contrainte normale moyenne au joint de grain
σ_t	Norme du vecteur de contraintes tangentielles, en moyenne au joint de grain

TABLE 2 – Principales notations utilisées dans ce mémoire (2)

Introduction

Dans les réacteurs nucléaires à eau pressurisée (REP), le combustible est constitué de pastilles de dioxyde d'uranium (UO_2) empilées dans des tubes métalliques, l'ensemble constituant un crayon combustible. Pendant l'irradiation, le tube de gainage en zircaloy joue le rôle de première barrière de confinement des produits de fission générés par les réactions nucléaires qui se produisent dans la pastille. Pour des raisons de sûreté, il est donc indispensable d'assurer l'intégrité de la gaine en comportement normal et incidentel du réacteur.

Dans cette optique, un programme de R&D mené conjointement par EDF, le CEA et AREVA a été mis en place. Au-delà de la seule sûreté, les objectifs de ce projet sont multiples : il s'agit non seulement d'améliorer la compréhension des phénomènes qui se produisent dans le crayon pendant l'irradiation, mais aussi d'augmenter la manoeuvrabilité des réacteurs et de proposer des innovations en matière de conception des éléments combustibles.

Les deux risques principaux de perte d'intégrité de la gaine sont d'une part la pressurisation interne du crayon associée au relâchement des produits de fission gazeux, et d'autre part l'interaction entre la pastille combustible et la gaine. L'étude de ces mécanismes est intimement liée à celle du comportement de combustible en réacteur, qui est lui-même régi par deux types de phénomènes liés respectivement aux gradients thermiques et à l'accumulation et au transport des produits de fission gazeux dans la pastille.

L' UO_2 subit en effet pendant l'irradiation des contraintes thermiques, issues du gradient de température (jusqu'à plusieurs centaines de degrés celsius par centimètre) entre la partie centrale de la pastille et son bord extérieur. Ces contraintes sont à l'origine d'un certain nombre de phénomènes mécaniques, tels que la fissuration du combustible ou l'activation de mécanismes de fluage à haute température. Par ailleurs, la microstructure polycristalline du combustible évolue pendant l'irradiation sous l'effet des réactions nucléaires. Des produits de fission gazeux s'accumulent dans les cavités (bulles et pores de fabrication) et provoquent le gonflement de la pastille. Associés à la dilatation thermique, ces phénomènes amènent le combustible au contact de la gaine : l'Interaction Pastille-Gaine (IPG) qui en résulte peut provoquer la rupture de la gaine par corrosion sous contrainte. La coalescence des bulles aux joints de grains provoque la formation de "canaux" de diffusion pour les produits de fission gazeux qui, relâchés par la pastille, augmentent la pression interne du crayon.

La modélisation de ces phénomènes nécessite de disposer d'outils de simulation multi-échelles et multi-physiques. C'est dans cet objectif que le projet PLEIADES (Plate-forme Logicielle pour les Eléments Irradiés dans les Assemblages, en Démonstration, en Expérimentation, ou en Service) a été développé conjointement par le CEA et ses partenaires industriels. Dans le cadre de ce projet, l'application ALCYONE permet de modéliser le comportement thermo-mécanique du crayon combustible REP, tandis que les phénomènes de transport de produits de fission sont traités par des applications dédiées telles que MARGARET.

Ces modèles, toutefois, reposent en partie sur une approche empirique du comportement du combustible. En particulier, le couplage entre le comportement thermo-mécanique de la

pastille et la physico-chimie relative aux produits de fission gazeux est réalisé à travers un modèle de “grain moyen”, défini comme une représentation moyenne (au sens statistique) de la microstructure polycristalline de l’UO₂. Afin d’enrichir la description de ce couplage, il est nécessaire de développer des simulations thermo-mécaniques à l’échelle de la microstructure qui permettront de traiter les deux domaines de la physique (thermo-mécanique et physico-chimie) à une échelle commune. C’est dans ce contexte d’amélioration et de raffinement de la modélisation que se situent ces travaux de thèse.

Ce mémoire décrit le développement d’une modélisation du fluage thermique de l’UO₂ à l’échelle du polycristal. L’objectif de ce travail est de mettre en place des outils et une méthodologie d’analyse de l’hétérogénéité des distributions de contraintes locales au sein d’un Volume Élémentaire Représentatif (VER) polycristallin soumis à une sollicitation effective donnée. Cette étude vise à réduire l’empirisme dans l’approche actuelle du couplage entre les différents domaines de la physique de l’UO₂, en enrichissant le modèle de “grain moyen” qui sert de cadre aux codes de calcul dédiés à la modélisation des phénomènes de transport des produits de fission.

Un des enjeux de la thèse est de prendre en compte les propriétés microstructurales de l’UO₂ (telles que les symétries du cristal ou les systèmes de glissement de dislocations) pour la description de son comportement thermo-mécanique, en incluant notamment la modélisation de phénomènes de micro-endommagement aux joints de grains et de concentration de contraintes, et la simulation de leurs conséquences sur le comportement des produits de fission. L’utilisation d’un formalisme commun pour la modélisation des phénomènes associés à la physico-chimie et ceux relevant du comportement thermo-mécanique permettra d’améliorer la compréhension de leur interaction.

Organisation du mémoire

La première partie de ce mémoire vise à introduire le contexte industriel de l’étude du combustible UO₂. Un premier chapitre présente brièvement le fonctionnement du Réacteur à Eau Pressurisée, et décrit les différents phénomènes qui pilotent le comportement du crayon combustible en réacteur, tels que mentionnés au cours de cette introduction. Le deuxième chapitre est consacré à une étude bibliographique qui rappelle les principaux éléments de modélisation relatifs au comportement du dioxyde d’uranium. Après avoir posé le cadre de ces travaux de modélisation, nous porterons une attention particulière à la présentation des modèles utilisés pour décrire les mécanismes de déformation viscoplastique du combustible à haute température. Enfin, nous présenterons la modélisation du crayon combustible dans PLEIADES, et en particulier la manière dont le couplage entre le comportement thermo-mécanique du combustible et la physico-chimie est traité. Ce dernier point sera l’occasion de souligner les limites de l’approche actuelle, et l’apport du modèle polycristallin.

La deuxième partie présente les développements réalisés pour la modélisation du Volume Élémentaire Représentatif polycristallin. Deux descriptions de l’agrégat sont envisagées au troisième chapitre : une approche à champ moyen (via une formulation auto-cohérente) et une approche par éléments finis, pour laquelle la géométrie du polycristal est décrite comme une mosaïque de Voronoï 3D-périodique. Le quatrième chapitre décrit la loi de comportement élasto-viscoplastique développée pour modéliser l’élasticité et le fluage thermique à l’échelle du monocristal. La représentativité du VER dans le domaine élastique est étudiée. Deux modèles sont successivement proposés pour le comportement en fluage du combustible, en intégrant à notre description l’information issue de la caractérisation expérimentale des systèmes de glissement de dislocations. L’identification des paramètres de ces modèles est réalisée en comparant le comportement effectif

du VER à la réponse des modèles macroscopiques de référence utilisés dans ALCYONE. Enfin, la décohésion intergranulaire est prise en compte par un modèle de zones cohésives.

Une première analyse des distributions de contraintes locales dans l'agrégat est présentée au cours de la troisième partie. Cette étude, présentée au cinquième chapitre, est l'occasion de définir certaines grandeurs locales telles que la distribution de pressions hydrostatiques moyenne par grain, qui permettront de déterminer l'effet du comportement micromécanique sur le transport des produits de fission. La robustesse des résultats obtenus en fonction du choix du maillage par éléments finis est analysée au sixième chapitre, à la fois en termes de comportement effectif et d'hétérogénéité du champ de contraintes. Le calcul des contraintes aux joints de grains fait l'objet d'une étude comparative au cours du septième chapitre. Différentes méthodes de calcul de contraintes interfaciales sont décrites et mises en oeuvre dans le cadre d'une simulation sur le polycristal.

Enfin, une première validation du modèle est proposée en deux temps. Le chapitre huit décrit une étude visant à retrouver des mesures expérimentales de décohésion intergranulaire sur le combustible. La mise en oeuvre du modèle d'éléments cohésifs présenté au chapitre quatre permet de simuler l'ouverture des joints de grains pour un polycristal soumis à une sollicitation de compression uniaxiale. Puis, pour quantifier l'effet de la microstructure sur le comportement mécanique de l' UO_2 en irradiation, un chargement de type rampe de puissance similaire aux essais expérimentaux menés sur des crayons combustible est appliqué au polycristal. Les résultats de cette étude sont présentés au chapitre neuf. L'analyse de l'hétérogénéité du champ de contraintes sur le VER permet de proposer une première analyse de l'effet de l'incompatibilité de déformation entre grains voisins sur le comportement des produits de fission dans différentes zones de la pastille.

Première partie

Contexte - Etat de l'art

Chapitre 1

Problématique industrielle

Ce chapitre situe le travail de thèse présenté dans ce mémoire au sein d'une problématique industrielle concrète. Il décrit le fonctionnement du Réacteur à Eau Pressurisée (REP) depuis un schéma d'assemblage général de l'installation jusqu'au comportement du combustible en situation d'irradiation nominale et en transitoire de puissance. Un soin particulier est apporté à la description des phénomènes d'Interaction Pastille-Gaine et de leurs conséquences sur la tenue mécanique des crayons combustible.

Ces différents éléments mettent en avant la nécessité d'une bonne compréhension du comportement du combustible aussi bien pour des motifs de sûreté que de performance. Cette démarche implique le développement d'outils de modélisation sophistiqués pour prendre en compte l'ensemble des phénomènes physiques mis en jeu, comme la plateforme logicielle PLEIADES développée au CEA.

Sommaire

1.1	Le réacteur à eau pressurisée	22
1.1.1	Principe de fonctionnement du réacteur	22
1.1.2	Le crayon combustible	24
1.1.3	Régimes de puissance nominal et incidentel	25
1.2	Comportement du combustible UO_2 sous irradiation	27
1.2.1	Réactions de fission et évolution de la microstructure	27
1.2.2	Comportement thermo-mécanique de la pastille et Interaction Pastille-Gaine	28
1.3	Vers la modélisation du combustible : le projet PLEIADES	30

1.1 Le réacteur à eau pressurisée

Les Réacteurs à Eau Pressurisée (REP) sont les réacteurs de puissance les plus communs à travers le monde et constituent l'intégralité du parc industriel Français. 58 installations de ce type ont été mises en service progressivement depuis 1977 dans l'hexagone. Leur puissance est comprise entre 900 MWe¹ et 1450 MWe, et ils contribuent à près de 90% de la production d'électricité en France.

1.1.1 Principe de fonctionnement du réacteur

Les différents composants d'un Réacteur à Eau Pressurisée sont destinés à produire de l'énergie et à la convertir en énergie électrique utilisable sur le réseau. Le coeur du réacteur, abrité par l'enceinte de la cuve, contient le matériau combustible qui génère l'énergie par réactions de fission. Cette énergie est récupérée sous forme de chaleur par le circuit primaire, puis transmise au circuit secondaire qui alimente les turbines électrogènes du réacteur. Le schéma de fonctionnement du réacteur est illustré à la figure 1.1.

Si par la suite ce document se concentrera principalement sur l'étude du comportement du combustible nucléaire, ce premier paragraphe a pour vocation de situer le dioxyde d'uranium au sein de son environnement industriel en décrivant les différents éléments du réacteur.

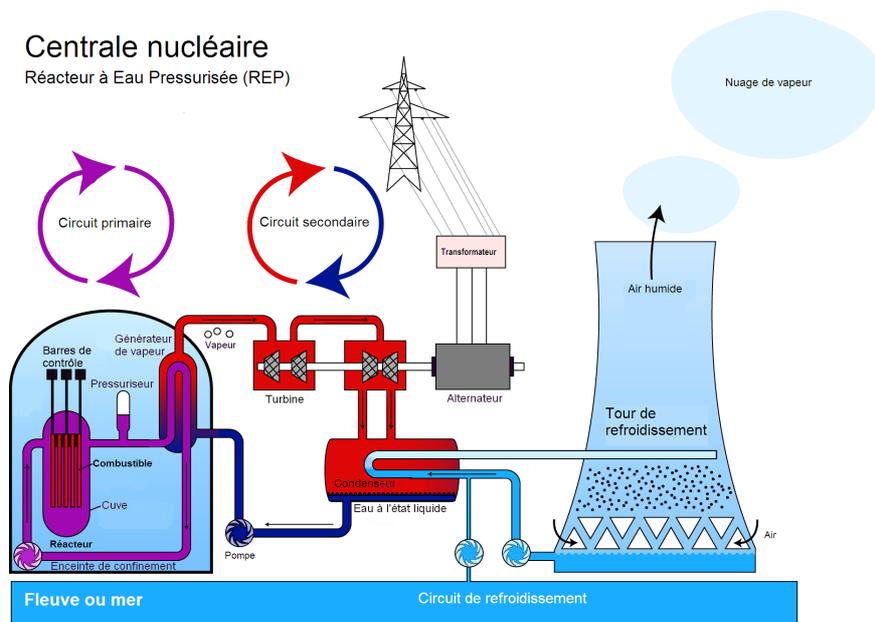


FIGURE 1.1 – Schéma de fonctionnement d'un réacteur REP

1.1.1.1 Le coeur du réacteur

Le coeur du réacteur est constitué d'un ensemble d'assemblages, eux-mêmes composés des tubes cylindriques de 4m de long qui contiennent le combustible, et appelés crayons combustibles. Chaque assemblage est un réseau carré qui contient 264 crayons combustibles ainsi que des grappes de commandes destinées à contrôler le fonctionnement du réacteur. Un coeur de réacteur 900 MWe est formé de 157 assemblages, soit plus de 40000 crayons.

1. MegaWatt électriques, qui correspondent à la puissance électrique produite par la centrale. Cette unité est utilisée pour distinguer la production électrique de la puissance thermique produite dans le coeur.

La figure 1.2 présente les différents composants qui forment le squelette de l'assemblage :

- les grilles de maintien, destinées à assurer la stabilité mécanique de l'ensemble ;
- les tubes guides, qui permettent l'introduction des barres de contrôles qui pilotent la puissance du réacteur en modifiant la réactivité du coeur par capture neutronique ;
- l'embout supérieur (de tête) qui permet la manipulation de l'assemblage ;
- l'embout inférieur (de pied) enfin, sur lequel repose l'assemblage combustible.

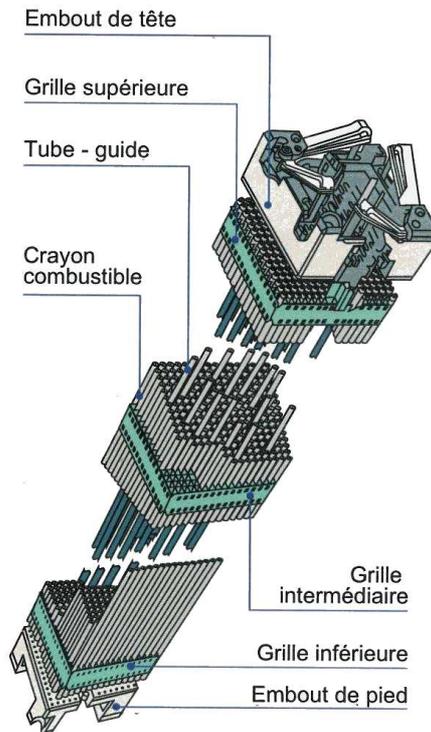


FIGURE 1.2 – Assemblage combustible d'un réacteur à Eau Pressurisée

Les crayons eux-mêmes sont composés d'une gaine cylindrique en alliage de zirconium, à l'intérieur de laquelle le combustible est contenu sous forme de pastilles d'oxyde d'uranium. Ces éléments seront décrits de manière plus détaillée au paragraphe 1.1.2.

1.1.1.2 Le circuit primaire

Le coeur du réacteur est plongé dans un fluide caloporteur dont le rôle est double : d'une part, évacuer la chaleur produite, et d'autre part, entretenir les réactions nucléaires en ralentissant les neutrons. Dans les réacteurs à eau pressurisée, ce rôle est joué par de l'eau à 15.5 MPa. Le fluide atteint la température de 320°C en sortie de coeur, avant de céder de la chaleur au circuit secondaire par le biais d'un échangeur thermique et recommence chaque cycle à la température de 285°C.

1.1.1.3 Le circuit secondaire

L'eau du circuit secondaire est vaporisée en recevant la chaleur du circuit primaire au coeur des générateurs de vapeur : la vapeur produite active les turbines, couplées à un alternateur et dont le mouvement permet de produire l'électricité. La vapeur est ensuite condensée et renvoyée vers l'échangeur pour un nouveau cycle.

La condensation de l'eau du circuit secondaire est réalisée par le biais d'un circuit tertiaire, dont l'eau est soit refroidie à son tour dans des tours aéroréfrigérantes, soit directement déversée dans un fleuve ou dans la mer.

1.1.2 Le crayon combustible

Le crayon combustible est l'élément central du coeur du réacteur. Il s'agit d'un ensemble cylindrique formé d'un tube de gainage dans lequel sont empilées des pastilles de combustible en dioxyde d'uranium. Les dimensions caractéristiques d'un crayon combustible sont données dans la figure 1.3. Initialement, les pastilles et la gaine ne sont pas en contact mais séparées par un espace appelé jeu pastille-gaine.

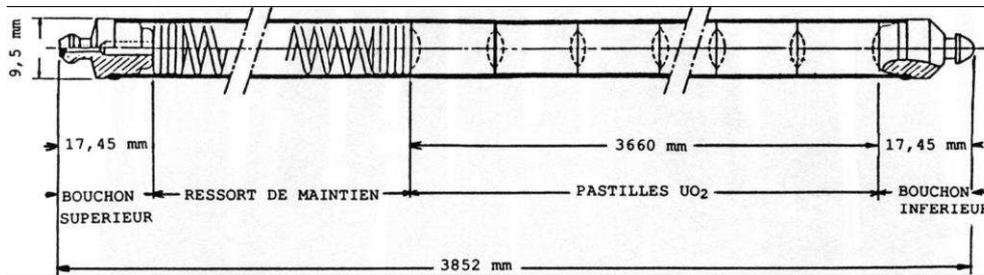


FIGURE 1.3 – Dimensions caractéristiques du crayon combustible

Les ressorts de maintien sont nécessaires pour accommoder le gonflement du combustible sous l'effet de l'augmentation de la température. Le crayon est sous une pression interne d'hélium d'environ 25 bar et clos hermétiquement par deux bouchons en inconel.

Le rendement local du crayon est caractérisé par sa puissance linéique (P_{lin} en $W.cm^{-2}$) définie comme la puissance générée par le crayon par unité de longueur fissile (ie. la longueur accumulée de l'empilement de pastilles combustibles). Les différents régimes de fonctionnement du crayon combustible seront plus longuement abordés par la suite, en particulier au paragraphe 1.1.3.

1.1.2.1 La gaine

La gaine constitue la première barrière de protection de l'environnement vis à vis des produits de fission et son intégrité doit être assurée quelles que soient les conditions de fonctionnement du réacteur. Le matériau retenu est le Zircaloy, un alliage de zirconium qui possède des propriétés adéquates en termes de neutronique, de tenue mécanique et de résistance à la corrosion par l'eau pressurisée à haute température du circuit primaire.

La compréhension des phénomènes à l'origine de la ruine de la gaine est l'enjeu de nombreux efforts de recherche et développement dans lesquels s'inscrit le travail présenté ici.

1.1.2.2 La pastille combustible

Dans les Réacteurs à Eau Pressurisée, le combustible est présent sous forme de pastilles cylindriques de dioxyde d'uranium (voir figure 1.4) empilées au sein du crayon.

Les pastilles combustibles sont chanfreinées de façon à faciliter leur introduction dans la gaine. L'évidement central a pour vocation d'accomoder les déformations du combustible pendant l'irradiation. Le comportement de la pastille combustible d'uranium sous irradiation sera plus longuement décrit au paragraphe 1.2.

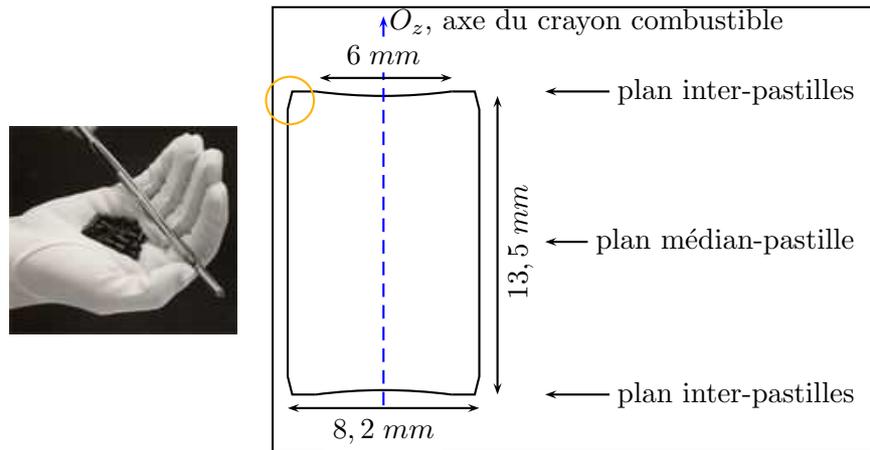


FIGURE 1.4 – La pastille combustible UO_2

Du point de vue microstructural, le combustible se présente sous la forme d'une céramique poreuse. Les tailles de grains mesurées pour le combustible standard sont comprises entre 5 et $30 \mu\text{m}$. Comme l'illustre la figure 1.5, différentes populations de cavités peuvent être distinguées dans l' UO_2 polycristallin :

- Les pores inter- et intragranulaires (image de gauche), de taille micrométrique et issus du procédé de fabrication du combustible ;
- Les bulles inter- et intragranulaires (image de droite), de taille nanométrique et créées au cours de l'irradiation.

Comme nous le verrons plus en détail par la suite (notamment au paragraphe 1.2), la microstructure du combustible est amenée à évoluer selon des processus complexes au cours de l'irradiation. Ces modifications impactent la tenue mécanique de la pastille. Tous ces phénomènes doivent donc être soigneusement modélisés pour la bonne compréhension du comportement du combustible dans les différents régimes de fonctionnement auxquels il est soumis.

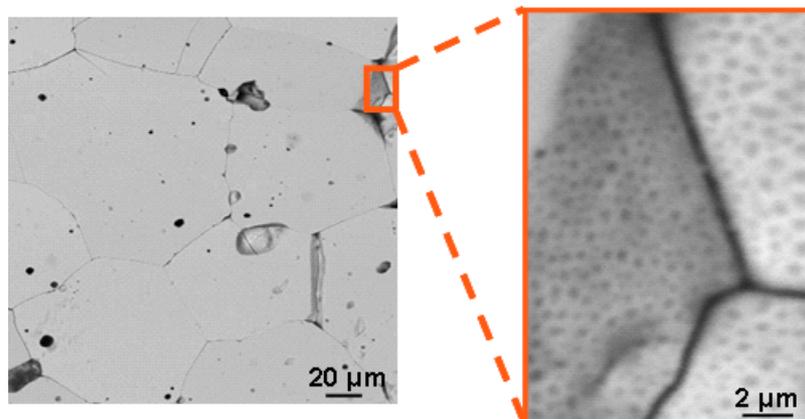


FIGURE 1.5 – Céramographie du combustible

1.1.3 Régimes de puissance nominal et incidentel

L'essentiel des études menées sur le comportement du crayon combustible s'attache à décrire son comportement sous deux régimes de puissance, appelés respectivement régime nominal et

régime incidentel.

1.1.3.1 Régime nominal du combustible

Le régime nominal de fonctionnement du crayon se caractérise par une grande stabilité de la puissance linéique générée au cours du temps, comme l'illustre la figure 1.6. La durée des cycles qui constituent ce régime de fonctionnement est approximativement un an. Au cours de ces cycles, les fluctuations observées sont principalement dues au suivi de la demande.

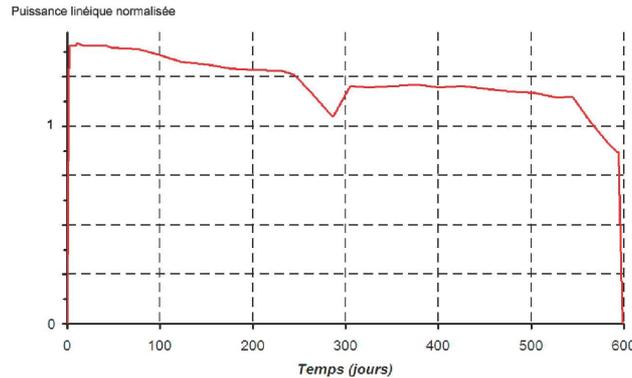


FIGURE 1.6 – Evolution de la puissance linéique du crayon combustible au cours du temps : régime nominal

1.1.3.2 Régime incidentel du combustible

Le régime incidentel (auquel nous ferons référence par la suite sous l'appellation irradiation en rampe de puissance), étudié dans le cadre de la sûreté nucléaire, correspond à une augmentation rapide de la puissance linéique (de l'ordre de $100 \text{ W.cm}^{-1}.\text{min}^{-1}$) jusqu'à atteindre environ 400 W.cm^{-1} , soit le double de la puissance nominale du crayon.

Comme illustré à la figure 1.7, la durée de maintien à ces niveaux de puissance est brève au regard des temps caractéristiques du régime nominal, et est comprise généralement entre quelques minutes et quelques heures.

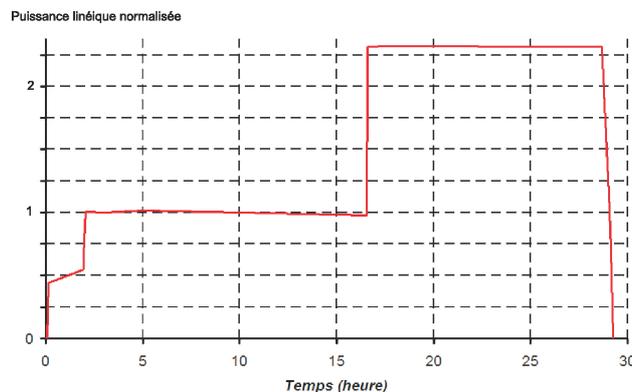


FIGURE 1.7 – Evolution de la puissance linéique du crayon combustible au cours du temps : régime incidentel

Le premier plateau représenté sur la figure 1.7 correspond à un palier de conditionnement appliqué en réacteurs expérimentaux pour reproduire le fonctionnement normal du crayon

combustible précédent la montée en rampe de puissance.

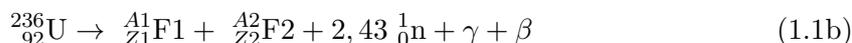
Nous avons dressé les grandes lignes de l’environnement du combustible REP au cours de ce premier paragraphe introductif. La section suivante, quant à elle, a vocation à présenter de façon qualitative les principales caractéristiques du comportement de l’ UO_2 sous irradiation. La description du comportement thermo-mécanique de la pastille, et en particulier son interaction avec la gaine, nous donneront l’opportunité de souligner une première fois la complexité des phénomènes mis en jeu et les motivations qui plaident en faveur d’une modélisation soignée de l’ UO_2 en service.

1.2 Comportement du combustible UO_2 sous irradiation

Différents aspects du comportement du combustible sont décrits au cours de cette section, depuis la microstructure de l’ UO_2 (qui évolue du fait de l’irradiation) jusqu’à l’Interaction Pastille-Gaine (notée par la suite IPG), en passant par le comportement thermo-mécanique macroscopique de la pastille.

1.2.1 Réactions de fission et évolution de la microstructure

La fission de l’uranium 235 présent dans la pastille combustible se décompose en deux étapes successives : la capture d’un neutron (1.1a), suivie de la réaction de fission (1.1b) proprement dite.



Les deux produits de fission ${}_{Z_1}^{A_1}\text{F1}$ et ${}_{Z_2}^{A_2}\text{F2}$, de nature chimique variable, entraînent une modification de la microstructure du combustible par gonflement.

1.2.1.1 Densification et gonflement gazeux

Du fait des conditions de pressions et de températures rencontrées par la pastille pendant l’irradiation, les porosités de fabrications présentes initialement dans le combustible (dont l’existence a été mise en évidence à la figure 1.4) ont tendance à voir leur volume réduire : ce phénomène est appelé densification.

Par ailleurs, la génération de produits de fission conformément à l’équation (1.1b) provoque un gonflement, qualifié respectivement de solide ou gazeux selon la nature des produits de fission mis en jeu. Un mécanisme d’interaction se met en place entre le gaz de fission dissous dans le réseau cristallin et les différentes populations de cavités présentes dans le combustible, pores de fabrications mais aussi bulles nouvellement créées.

Ces modifications de la microstructure du combustible ont une influence sur la tenue mécanique du crayon, comme nous le verrons par la suite. La simulation de ces phénomènes fait l’objet de modèles dits de “physico-chimie”, dont le fonctionnement est décrit au paragraphe 2.4.2.

1.2.1.2 Restructuration du combustible

Lorsque suffisamment de produits de fission et de défauts d’irradiation se sont accumulés dans le combustible, celui-ci subit une restructuration : les grains (dont la taille initiale est d’environ $10 \mu\text{m}$) se subdivisent en grains d’environ $0.2 \mu\text{m}$ de diamètre. Cette restructuration est surtout

observée dans la zone du “Rim” en périphérie de pastille, où la diffusion des produits de fission est plus difficile du fait d’une température plus basse.

La figure 1.8 est une micrographie d’une zone restructurée du combustible. Dans cette zone, la porosité induite par la formation de bulles atteint 10% du volume de matière du fait du faible relâchement.

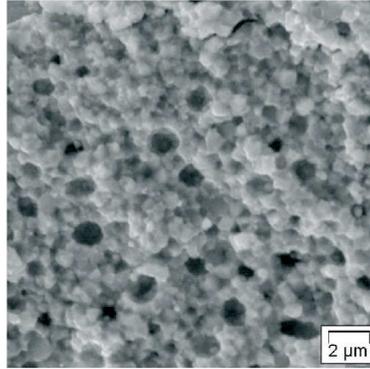


FIGURE 1.8 – Microstructure du combustible restructuré. Les grains initiaux ont été remplacés par des grains submicrométriques et des bulles de gaz de fission se sont formées

Cette restructuration n’apparaît qu’après un nombre important de cycles d’irradiation. Etant donné que nous nous intéresserons par la suite à des crayons expérimentaux ayant subi seulement deux cycles en réacteur, cette problématique particulière ne sera plus abordée.

Les modifications microstructurales décrites dans cette section impactent le comportement thermo-mécanique du combustible à l’échelle macroscopique. C’est sur ce dernier aspect que nous allons à présent nous concentrer.

1.2.2 Comportement thermo-mécanique de la pastille et Interaction Pastille-Gaine

La description du comportement thermo-mécanique de la pastille combustible en service est largement basée sur la revue proposée par [Helfer 06]. Sans décrire dans le détail la totalité des phénomènes mis en jeu, notre objectif est de souligner d’un point de vue phénoménologique l’influence du combustible sur la tenue mécanique de la gaine (à travers l’Interaction Pastille-Gaine, à laquelle nous nous référerons par la suite sous le nom d’IPG), en gardant à l’esprit le rôle de celle-ci en tant que barrière de confinement des matières radioactives.

1.2.2.1 Thermo-élasticité du combustible et fissuration

En assimilant la pastille à un cylindre infini de rayon R et de conductivité thermique k , soumis à une puissance linéique P_{lin} , le profil radial de température $T(r)$ obtenu par intégration de la loi de Fourier est de la forme :

$$T(r) = T_{coeur} - \frac{P_{lin}}{4\pi k} \left(\frac{r}{R} \right)^2 \quad (1.2)$$

Ce profil parabolique indique que la température T_{coeur} au coeur de la pastille est plus importante que celle en périphérie. Du fait de la faible conductivité thermique de l’UO₂, la dilatation thermique différentielle issue de ce champ de température génère des contraintes importantes dans la pastille.

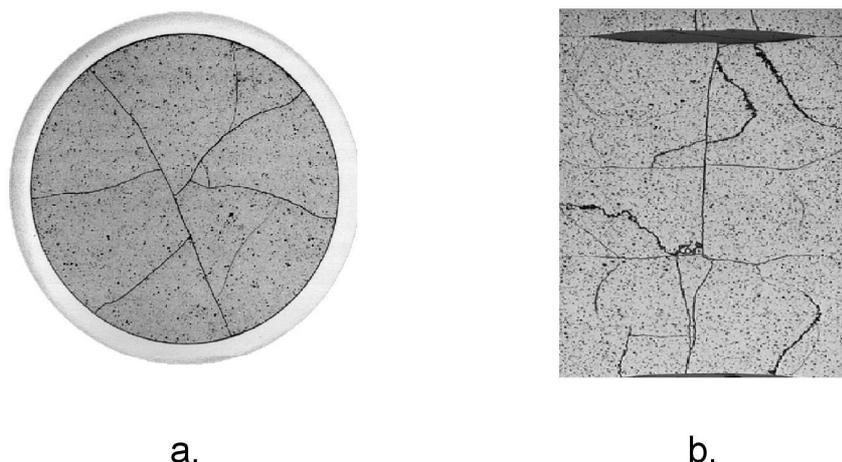


FIGURE 1.9 – Fissuration de la pastille UO_2 après deux cycles REP annuels : réseau de fissures radiales (a.) et axiales (b.)

Ces contraintes sont suffisamment élevées pour provoquer dès le régime nominal la fragmentation du combustible (dont la contrainte à rupture est de l'ordre de la centaine de MPa) selon un réseau de fissures axiales et radiales, comme illustré à la figure 1.9. Les fragments ainsi générés vont combler en partie le jeu pastille-gaine initial.

La dilatation thermique induite par le gradient thermique (1.2) conduit les fragments à adopter une forme spécifique, dite en “diabolo”, qui correspond au sur-déplacement au niveau des plans inter-pastille par rapport aux plans médian-pastille. Le diabolo, ainsi que la fragmentation de la pastille, sont illustrés schématiquement à la figure 1.10.

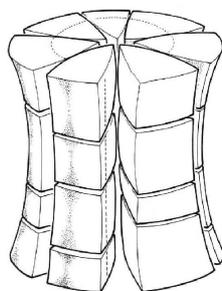


FIGURE 1.10 – Représentation schématique de la fissuration et du diabolo

Cette évolution particulière du combustible influence le comportement de la gaine, en particulier en situation incidentelle. Ce phénomène, appelé Interaction Pastille-Gaine, va faire l'objet du paragraphe suivant.

1.2.2.2 L'Interaction Pastille-Gaine

Comme mentionné au paragraphe 1.1.2, il existe initialement un jeu non nul entre la pastille et la gaine. Ce jeu tend à se refermer sous irradiation sous l'action conjuguée de plusieurs phénomènes :

- La fragmentation du combustible, décrite dans la section précédente ;
- La mise en diabolo, qui accélère ce phénomène au niveau des plans inter-pastilles ;
- Le fluage de la gaine, mise en compression par le fluide caloporteur.

Le contact se produit après un cycle d'irradiation en régime nominal. Comme illustré à la figure 1.11, la pastille imprime ses déformations à la gaine, laquelle prend une forme de bambou.

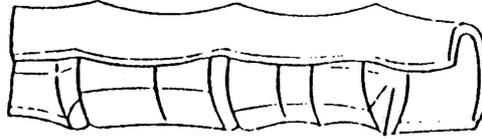


FIGURE 1.11 – Contact Pastille-Gaine et effet bambou

Il est généralement admis que la fragmentation de la pastille génère des surcontraintes dans la gaine au niveau du point triple, défini comme l'intersection des plans de fissuration radiale et du plan inter-pastille en peau interne de gaine, comme le montre la figure 1.12. Les niveaux de sollicitation atteints, en particulier dans le cas du fonctionnement en régime incidentel, peuvent provoquer la ruine de la gaine.

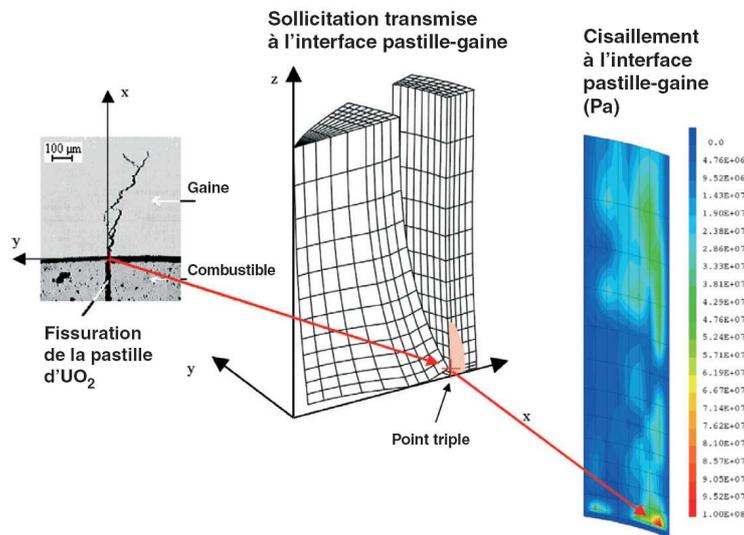


FIGURE 1.12 – Concentration de contraintes au niveau du point triple lors de l'IPG

L'Interaction Pastille-Gaine est donc la principale motivation industrielle pour l'étude du combustible UO_2 , en particulier dans la mesure où, étant particulièrement sensible lors de transitoires de puissance, elle limite la manoeuvrabilité des centrales.

Etant donnée la complexité des mécanismes mis en jeu, la bonne compréhension du comportement du combustible nécessite de mettre en place des outils de modélisation sophistiqués basés sur une approche multi-échelles, multi-physiques permettant de prendre en compte l'ensemble des phénomènes depuis la microstructure de l' UO_2 jusqu'à l'échelle du crayon. La plateforme PLEIADES, développée conjointement par le Commissariat à l'Energie Atomique et ses partenaires industriels, vise à répondre à cette problématique.

1.3 Vers la modélisation du combustible : le projet PLEIADES

Nous avons mis en avant au cours de ce premier chapitre l'intérêt industriel de la bonne compréhension du comportement du combustible UO_2 sous irradiation. En particulier, la manière dont l'Interaction Pastille-Gaine peut mener à la ruine de la gaine, première barrière de confinement

des matières radioactives, fait de cette problématique un enjeu à la fois en termes de rendement et de sûreté.

Pour des raisons évidentes liées à la fois à la radioactivité des matériaux étudiés et au fort endommagement de la pastille irradiée, l'étude expérimentale du problème de l'IPG est une tâche aussi complexe que coûteuse. Dans ce cadre, il est aisé de comprendre l'intérêt des simulations numériques pour compléter les résultats des essais et enrichir la connaissance des phénomènes qui se produisent dans le combustible en service.

Le projet PLEIADES (Plateforme Logicielle pour les Eléments Irradiés dans les Assemblages, en Démonstration, en Expérimentation ou en Service) a été développé par le CEA et ses partenaires pour la modélisation des différentes filières combustibles nucléaires.

Dans le cadre de ce projet, l'application ALCYONE est consacrée à la simulation du crayon REP dans une approche de recherche et développement. La modélisation thermo-mécanique développée dans ALCYONE est couplée à un code de calcul relatif à la physique des gaz de fission (l'un de ces codes, MARGARET, sera présenté au chapitre suivant), dont le rôle est de simuler l'évolution de la microstructure du combustible sous irradiation.

Le deuxième chapitre de ce mémoire vise à présenter succinctement les différents modèles qui ont été proposés pour la simulation du comportement de l' UO_2 . Une part importante de ce chapitre se concentre en particulier sur les différents mécanismes de déformation visco-plastique opérant dans les gammes de sollicitations rencontrées pendant une irradiation en rampe de puissance. Nous conclurons sur l'approche multi-échelle adoptée par PLEIADES et ses limites pour la compréhension du couplage entre comportement micromécanique du combustible de la pastille et comportement des gaz de fission.

Chapitre 2

Etat de l'art pour la modélisation du comportement de l'UO₂

La modélisation du comportement de l'UO₂ sous irradiation a fait l'objet d'une série de travaux de recherche. Comme nous l'avons vu au chapitre précédent, cette modélisation recouvre différents aspects, fortement couplés entre eux :

- l'évolution de la microstructure du combustible sous irradiation ;
- le comportement thermo-mécanique du matériau vierge et irradié ;
- le comportement des produits de fission gazeux.

Le premier paragraphe de ce chapitre dresse un cadre général pour la modélisation de l'UO₂, avant de nous intéresser plus en détail aux différents modèles de fluage stationnaire (thermique et d'irradiation) proposés pour la modélisation de l'UO₂, pour aboutir à la description du modèle de fluage développé par Gatt et Monerie qui sera utilisé pour valider le modèle d'agrégat présenté dans ce mémoire.

Enfin, le chapitre se clôt en soulignant les limites de l'approche multi-échelles développée jusqu'à présent et la nécessité de mettre en place un modèle d'agrégat polycristallin pour l'étude de l'UO₂.

Sommaire

2.1	Cadre de la modélisation	34
2.1.1	Sollicitations thermo-mécaniques reconstrées au cours de l'irradiation . . .	34
2.1.2	Essais de caractérisation mécanique du matériau vierge	35
2.1.3	Prise en compte des effets de l'irradiation sur le combustible	37
2.2	Modèles de fluage élémentaires	39
2.2.1	Modèles fluage-diffusion	39
2.2.2	Modèles de fluage dislocations	42
2.2.3	Cartes de mécanismes de déformation	45
2.2.4	Fluage et irradiation	46
2.3	Loi Gatt-Monerie	47
2.3.1	Modélisation du fluage thermique stationnaire	48
2.3.2	Traitement de la porosité	50
2.4	Modélisation du combustible UO₂ en réacteur	50
2.4.1	Modélisation mécanique de l'UO ₂ sous irradiation	50
2.4.2	Prise en compte de l'évolution de la microstructure	53
2.4.3	Conclusions : les limites de l'approche multi-échelles	55

2.1 Cadre de la modélisation

Ce paragraphe reprend de façon plus détaillée la description du comportement de l'UO₂ sous irradiation présentée au paragraphe 1.2. Il s'agit de donner les contours du travail de modélisation, en particulier en termes de gammes de sollicitations thermo-mécaniques et de phénomènes observés expérimentalement.

Nous détaillerons notamment les différents mécanismes de déformation viscoplastique à l'oeuvre pendant l'irradiation, en différenciant :

- le fluage thermique, associé à des phénomènes de diffusion et observé lors d'essais sur le matériau vierge ;
- le fluage d'irradiation, généré par les pointes de fissions et athermique¹.

2.1.1 Sollicitations thermo-mécaniques rencontrées au cours de l'irradiation

Un des premiers défis présentés par la simulation du comportement de l'UO₂ en service est l'étalement de la gamme de sollicitations thermo-mécaniques rencontrées pendant l'irradiation. Celui-ci est intimement liée aux régimes de fonctionnement du crayon, présentés au paragraphe 1.1.3.

La description proposée dans la suite de ce paragraphe se base principalement sur le cas d'un crayon réirradié dans le réacteur expérimental OSIRIS après une irradiation en réacteur de puissance. Ce crayon a déjà fait l'objet de nombreuses études (voir notamment [Colin 03], [Helfer 06]) et servira à la validation de notre modèle d'agrégats au chapitre 9.

2.1.1.1 Fonctionnement en régime nominal

En irradiation de base, la température du combustible est comprise entre 950 °C au centre de la pastille et 400 °C en périphérie.

En dépit des phénomènes complexes qui se produisent au cours de cette première phase (refermeture du jeu pastille-gaine, fissuration) et qui ont déjà été décrits qualitativement au paragraphe 1.2, les niveaux de températures atteints sont trop faibles pour une contribution significative du fluage thermique. La déformation visco-plastique du combustible se produit uniquement par fluage d'irradiation, athermique, sur lequel nous reviendrons au paragraphe 2.1.3.

2.1.1.2 Fonctionnement en rampe de puissance

Les températures rencontrées pendant l'irradiation en rampe de puissance sont extrêmement importantes, notamment au coeur de la pastille où elle peut atteindre 2200°C. L'état de sollicitation mécanique dans le combustible est associé à la présence de forts gradients thermiques (jusqu'à 600°C. cm⁻¹).

Alors que le coeur de la pastille est en situation de compression multiaxiale (proche d'un état de contrainte hydrostatique), la périphérie est quant à elle en traction biaxiale dans les directions orthoradiale et axiale. L'évolution de la distribution de contraintes au sein de la pastille au cours de la montée en rampe est présentée à la figure 2.1. Le chapitre 9 sera l'occasion de revenir plus en détail sur l'état de sollicitation du combustible, en particulier dans le cas d'une rampe de puissance. Notons encore que, malgré la complexité des phénomènes mis en jeu, les niveaux de déformation effectifs atteints en rampe restent relativement faibles (inférieurs à 0.5% dans tous les

1. La dépendance en température de ce mécanismes est très faible comparativement à celle des autres mécanismes étudiés. En particulier, le fluage d'irradiation est le seul à être actif même pour les "basses" températures rencontrées en fonctionnement de base.

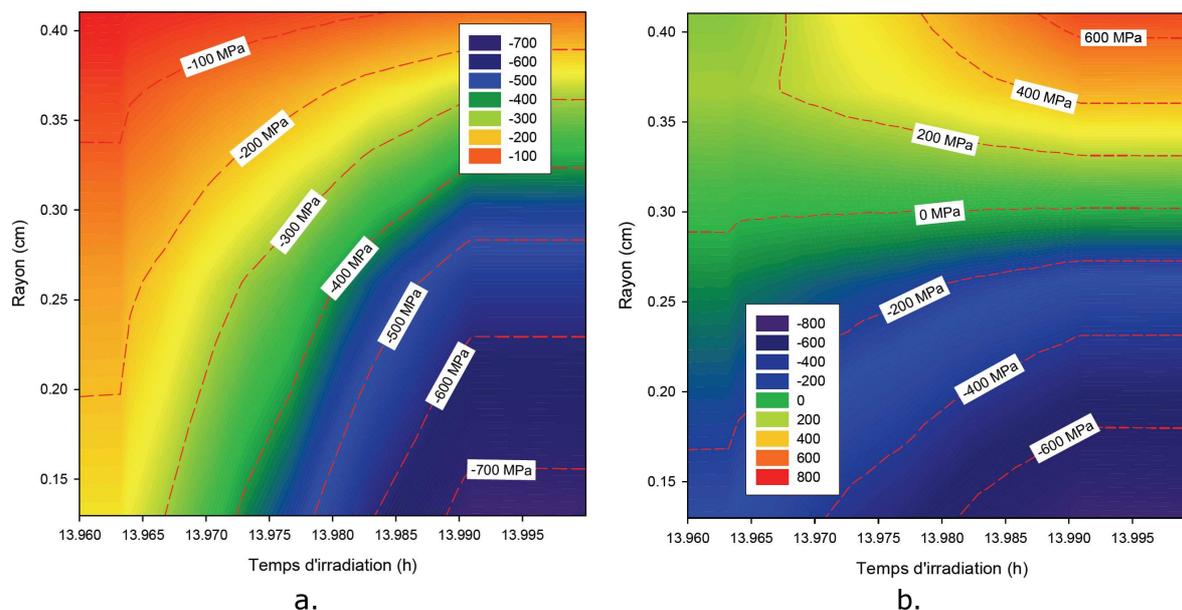


FIGURE 2.1 – Distributions de contrainte radiale (a.) et tangentielle (b.) dans la pastille au cours d'une montée en rampe de puissance [Colin 03]

cas), à l'exception de zones localisées telles que les évidements. Les vitesses de sollicitation, quant à elles, sont au maximum de l'ordre de $20\mu.\text{min}^{-1}$.

En termes de comportement, le coeur de la pastille est le siège de déformations viscoplastiques qui permettent de relaxer les contraintes dans le combustible. En périphérie, le comportement de l' UO_2 reste élastique-fragile et c'est la fissuration qui permet la relaxation des contraintes.

Sans avoir vocation à décrire complètement l'ensemble des sollicitations présentes au cours de l'irradiation, ce paragraphe introductif a permis de préciser les gammes de sollicitations imposées à la pastille combustible. De nombreuses études expérimentales ont par ailleurs été menées sur l' UO_2 vierge, destinées à améliorer la compréhension des mécanismes de déformation viscoplastiques à l'oeuvre pour les différents domaines de températures et de contraintes envisagés.

2.1.2 Essais de caractérisation mécanique du matériau vierge

Du fait de leur fissuration, mais surtout des difficultés liées au travail sur des matériaux radioactifs, l'étude a posteriori des pastilles irradiées s'avère éminemment complexe. De fait, la connaissance du comportement mécanique de l' UO_2 repose principalement sur des essais sur le combustible vierge dont les principaux résultats vont être décrits dans ce paragraphe.

2.1.2.1 Essais de fluage

L'allure du tracé de l'évolution de la déformation axiale au cours du temps lors d'un essai à contrainte imposée est présentée à la figure 2.2. Trois stades sont généralement distingués :

- le fluage primaire, pendant lequel la vitesse de fluage $\dot{\epsilon}$ diminue. Cette phase d'érouissage correspond à une réorganisation interne du matériau, par exemple par formation d'une structure de dislocations intragranulaire ou par réarrangement des grains.
- le fluage secondaire, aussi appelé stationnaire et caractérisé par une vitesse de déformation constante.
- le fluage tertiaire, au cours duquel le matériau perd en rigidité par endommagement.

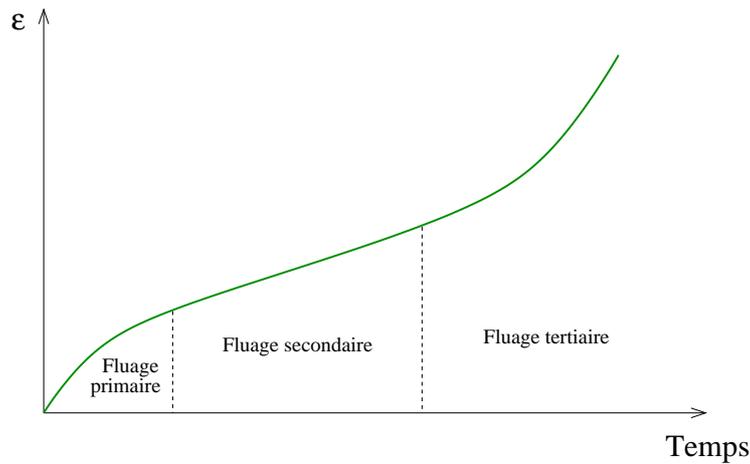
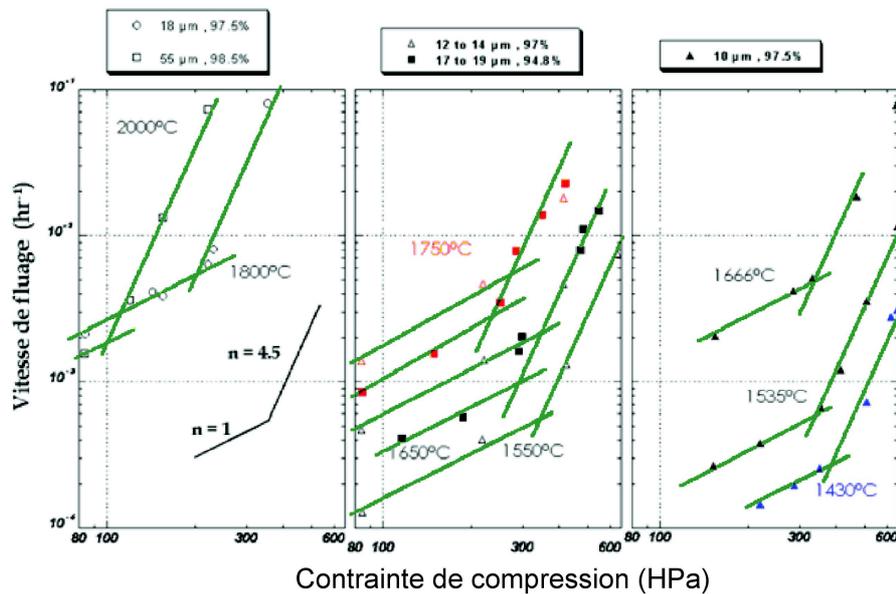


FIGURE 2.2 – Courbe schématique du fluage

Nous décrirons au paragraphe 2.2 plusieurs modèles destinés à modéliser le comportement du combustible pendant la phase de fluage stationnaire.

De nombreuses études [Seltzer 72], [Wolfe 67] ont mis en évidence la présence de deux domaines distincts pour le comportement de l'UO₂. Le tracé de la courbe $\dot{\epsilon} = f(\sigma)$ dans un diagramme logarithmique, tel que présenté à la figure 2.3, met en évidence la distinction entre ces deux régimes, schématisés chacun par un segment de droite.


 FIGURE 2.3 – Courbes de fluage de l'UO₂ à haute température [Seltzer 72]

Chaque segment de droite dans le diagramme logarithmique correspond à une loi puissance d'exposant n différent. Comme nous le verrons au paragraphe 2.2, ces deux régimes sont respectivement associés à un mécanisme de fluage par diffusion de lacunes (pour lequel $n \simeq 1$) dans le domaine des “basses” contraintes et à un mécanisme de fluage par mouvement de dislocations (avec $n \in [4; 7]$) dans le domaine des “hautes” contraintes.

2.1.2.2 Essais d'écouissage

Des essais d'écouissage (aussi appelés essais de Déformation à Vitesse Constante, ou DVC) en compression uniaxiale sur des pastilles combustible ont mis en évidence la présence d'un pic de compression, qui correspond à l'adoucissement observé sur les courbes expérimentales présentées à la figure 2.4.

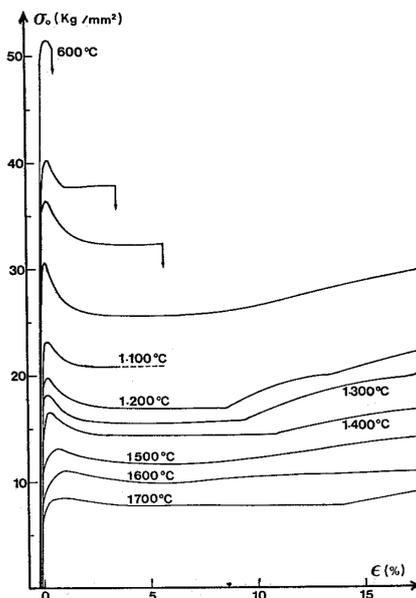


FIGURE 2.4 – Courbes effort-déformation de l'UO₂ à vitesse de compression constante $\dot{\epsilon} = 2.3e - 4 \text{ s}^{-1}$ pour différentes températures [Guérin 85]

Ce pic a été observé pour différentes vitesses de sollicitations $\dot{\epsilon} \in [1.18e - 5; 1.18e - 3] \text{ s}^{-1}$, principalement dans le domaine des “basses” températures. Au-delà de 1400 °C, l'amplitude du pic diminue jusqu'à disparaître pour des températures supérieures à 1500 °C et pour des vitesses inférieures à $4.e-5 \text{ s}^{-1}$.

Etant donnée la gamme de vitesses considérée, l'apparition du pic a été associée au comportement des dislocations dans le combustible [Sauter 01]. Ce type de comportement a en effet été observé pour d'autres matériaux caractérisés par leur faible densité de dislocations initiale [Bénard 84]. L'hypothèse la plus souvent proposée relie le caractère adoucissant de l'UO₂ à la multiplication brutale de dislocations, qui prennent part à la déformation viscoplastique par glissement. Le modèle de plasticité cristalline présenté au paragraphe 4.2 sera l'occasion de revenir plus en détail sur ces phénomènes.

Cet aperçu rapide de la connaissance expérimentale du combustible va à présent guider les différentes étapes de la modélisation mécanique. Comme nous allons le voir, différents modèles de complexités variables ont été proposés pour simuler le comportement de l'UO₂ dans le domaine viscoplastique.

2.1.3 Prise en compte des effets de l'irradiation sur le combustible

En complément des essais de caractérisation sur combustible vierge, de nombreux travaux ont été menés pour connaître l'effet de l'irradiation sur l'UO₂.

2.1.3.1 Effets de l'irradiation sur le fluage de l'UO₂

Des études en réacteur [Clough 70], [Solomon 73] ont analysé le comportement mécanique du combustible sous irradiation. Les résultats obtenus mettent en évidence deux phénomènes :

- l'existence d'un mécanisme de fluage athermique, proportionnel au taux de fission², aussi appelé fluage induit ;
- un effet coopératif d'accélération du fluage thermique sous irradiation.

La présence d'un fluage induit par irradiation, et activé même à des températures "basses" (< 1000°C) est illustré à la figure 2.5.

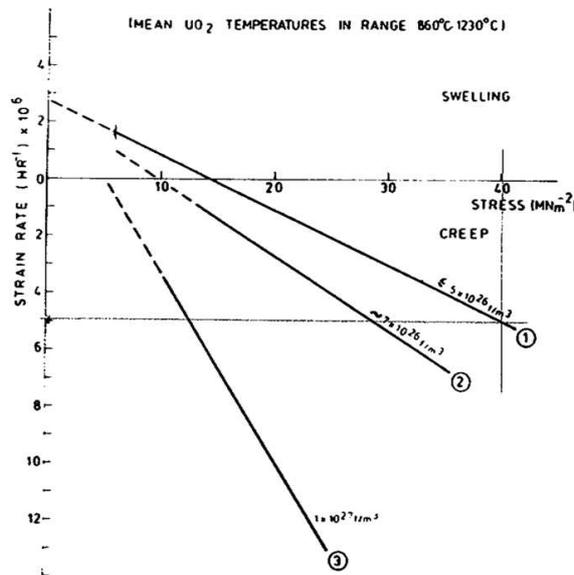


FIGURE 2.5 – Evaluation de la vitesse de fluage avec la densité volumique de fissions [Gatt 05]

Les modélisations proposées pour simuler le fluage d'irradiation, ainsi que les mécanismes associés, seront décrits plus en détail au paragraphe 2.2.4.

2.1.3.2 Produits de fission et évolution de la microstructure

L'évolution de la microstructure du combustible sous irradiation est étroitement liée à la présence de produits de fission gazeux et solides. Nous avons déjà décrit au paragraphe 1.2 les principaux phénomènes impliqués :

- le gonflement gazeux ou solide, dû à la présence de produits de fission dans l'UO₂ ;
- la restructuration, contrôlée par la concentration locale en défauts dans la pastille.

La prise en compte de ces phénomènes nécessite de modéliser les échanges de matière entre les produits de fission dissous dans le réseau cristallin et les différentes populations de cavités intra- et intergranulaires. La manière dont ce problème est traité dans les codes actuels sera décrite au paragraphe 2.4.2.

Nous avons décrit au cours de ce paragraphe l'ensemble des phénomènes qui se produisent au sein de la pastille d'UO₂ sous irradiation. Du point de vue de la mécanique, ces phénomènes peuvent être introduit dans une loi de comportement de la forme [Michel 04] :

2. Soit le nombre de fissions par seconde et par m³ de combustible.

$$\tilde{\sigma} = \tilde{C} : \left(\tilde{\varepsilon}^{tot} - \tilde{\varepsilon}^{fl} - \tilde{\varepsilon}^{fis} - \sum_{i \in N} \tilde{\varepsilon}^{gi} \right) \quad (2.1)$$

avec :

- ▷ \tilde{C} le tenseur d'élasticité du combustible ;
- ▷ $\tilde{\varepsilon}^{fl}$ la déformation viscoplastique, incluant des mécanismes d'origine thermique et le fluage d'irradiation ;
- ▷ $\tilde{\varepsilon}^{fis}$ la déformation de fissuration ;
- ▷ $\tilde{\varepsilon}^{gi}$ la déformation associée au i^{eme} mécanisme de gonflement, généré par les produits de fission dans le combustible, au point considéré.

L'équation (2.1) permet de modéliser le couplage entre les phénomènes d'origine thermo-mécanique (élasticité, fluage, fissuration) et ceux qui relèvent de la physico-chimie (gonflements).

Nous allons maintenant nous intéresser plus précisément aux différents modèles de fluage proposés pour modéliser le comportement viscoplastique de l'UO₂.

2.2 Modèles de fluage élémentaires

De nombreux modèles ont été développés pour rendre compte des phénomènes de fluage observés expérimentalement. Dans le cas du combustible, ces modèles peuvent être regroupés en plusieurs catégories :

- le fluage thermique par diffusion de lacunes (on parle alors de fluage-diffusion) ;
- le fluage thermique par mouvements de dislocations qui pilotent la déformation (par la suite, nous utiliserons le terme de fluage dislocations) ;
- le fluage d'irradiation.

Remarquons encore une fois la différence entre les deux premiers types de mécanismes, observés lors d'essais sur le combustible vierge, et le fluage d'irradiation, qui dépend lui du taux de fissions dans l'UO₂.

Tous ces mécanismes sont décrits à l'échelle macroscopique avec le même formalisme par une loi puissance, qui relie la vitesse de déformation viscoplastique $\dot{\varepsilon}$ et la contrainte équivalente de Von Mises σ_{eq} sous la forme :

$$\dot{\varepsilon} = A \sigma_{eq}^n e^{\left(\frac{-Q}{RT}\right)} \quad (2.2)$$

avec :

- ▷ A un paramètre du modèle, dépendant de la microstructure du matériau ;
- ▷ Q l'énergie d'activation associée au mécanisme de fluage considéré ;
- ▷ R et T respectivement la constante des gaz parfaits et la température absolue du matériau.

Le tenseur de déformation viscoplastique $\dot{\varepsilon}$ du matériau s'écrit alors :

$$\dot{\varepsilon} = A \sigma_{eq}^n e^{\left(\frac{-Q}{RT}\right)} \frac{\partial \sigma_{eq}}{\partial \sigma} \quad \text{où} \quad \frac{\partial \sigma_{eq}}{\partial \sigma} = \frac{3}{2} \frac{\sigma_d}{\sigma_{eq}} \quad (2.3)$$

avec σ_d la partie déviatorique du tenseur des contraintes. Dans la suite de ce chapitre, l'équation (2.2) qui caractérise la vitesse de fluage associée à un mécanisme de déformation sera écrite pour plus de commodité sous la forme $\dot{\varepsilon} = f(\sigma)$.

2.2.1 Modèles fluage-diffusion

Le terme de fluage-diffusion regroupe un certain nombre de mécanismes décrits sur un élément de volume assimilé à un grain, pour lequel les joints de grains sont des surfaces puits ou sources de

lacunes. Ces modèles reposent sur l'hypothèse commune, initialement formulée par [Nabarro 48], selon laquelle la déformation est contrôlée par la diffusion de lacunes. L'idée directrice se décompose en trois temps :

- l'application d'une contrainte à la surface du grain modifie la concentration locale de lacunes ;
- le gradient de concentration de lacunes associé aux différentes contraintes appliquées sur les faces de l'élément de volume génère un flux de lacunes ;
- la matière, suivant un chemin inverse aux lacunes, crée une déformation élémentaire par atome.

Ces modèles font l'hypothèse que l'absorption/émission de lacunes se fait de façon instantanée. Comme nous allons le voir, ils se caractérisent généralement par une dépendance linéaire à la contrainte et une dépendance à la taille de grain.

2.2.1.1 Fluage diffusion intra- et intergranulaire

[Nabarro 48] a été le premier à proposer un mécanisme de fluage associé à la diffusion de lacunes à l'intérieur d'un cristal. Le modèle communément nommé fluage de Nabarro-Herring se caractérise par une seconde hypothèse, selon laquelle la diffusion se fait de façon volumique à travers le grain, comme illustré figure 2.6. Ce modèle se caractérise par une dépendance $\dot{\epsilon} \propto D_{vol} \cdot \sigma \cdot \frac{1}{d^2}$ où D_{vol} est le coefficient d'auto-diffusion du matériau et d la taille de grain.

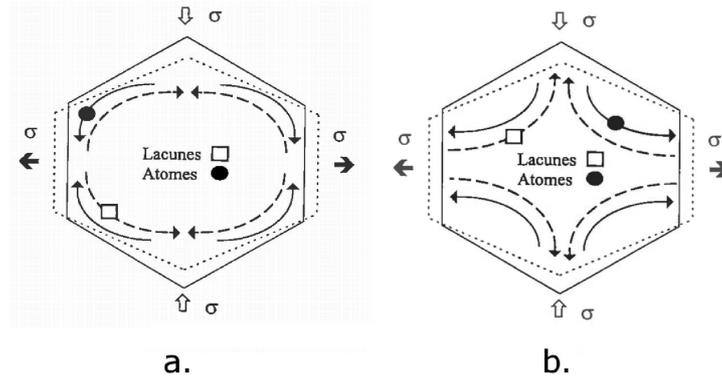


FIGURE 2.6 – Modèles de fluage-diffusion (a.) intergranulaire (Coble) (b.) intragranulaire (Herring)

[Coble 63] a proposé une extension de ce modèle en considérant la diffusion le long des joints de grains plutôt qu'en volume. Dans ce cas le modèle se met sous la forme $\dot{\epsilon} \propto D_{JdG} \cdot \sigma \cdot \frac{1}{d^3}$ avec D_{JdG} le coefficient de diffusion aux joints de grains.

2.2.1.2 Diffusion et glissement aux joints de grains

D'autres auteurs ont proposé des mécanismes de fluage-diffusion associés au glissement au niveau des joints de grains. Dans le cadre de cette approche, la déformation intergranulaire permet d'accomoder le glissement de façon à maintenir la cohérence au niveau des joints.

Le modèle de [Raj 71], illustré à la figure 2.7, considère que les deux mécanismes de diffusion et de glissement participent à la déformation et s'accomodent réciproquement. Par ailleurs ce modèle, dit de Ashby et Raj, prend en compte la diffusion de lacunes à la fois dans le volume et au joint de grain.

[Ahsby 73] propose un mécanisme basé lui aussi sur le glissement intergranulaire accomodé par la diffusion, pour lequel la déformation est contrôlée par le réarrangement entre grains voisins.

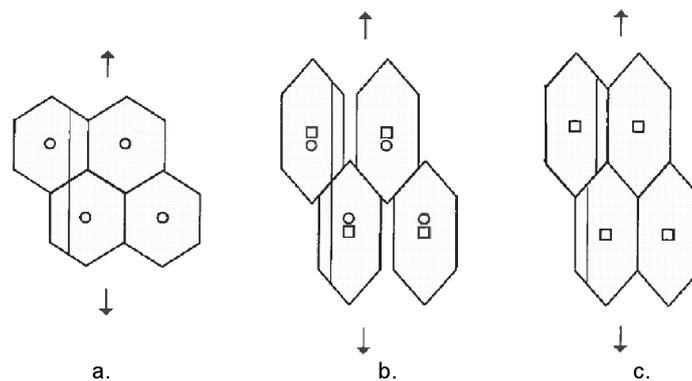


FIGURE 2.7 – Modèle de fluage de Ashby et Raj : sollicitation du polycristal (a.), fluage diffusion (b.), accomodation par glissement aux joints de grains (c.)

Dans ce modèle, communément appelé modèle de Ashby et Verrall, la déformation finale des grains est nulle et seule la réorganisation à l'échelle du polycristal génère une déformation macroscopique, comme l'illustre la figure 2.8. Ce type de mécanisme peut jouer un rôle significatif en particulier pour de très faibles tailles de grains.

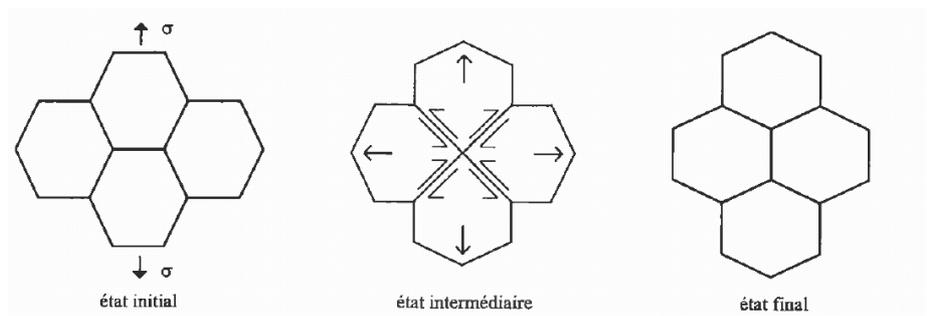


FIGURE 2.8 – Modèle de fluage de Ashby et Verrall : La déformation d'ensemble est non nulle mais les grains n'ont pas changé de forme [Ashby 73]

2.2.1.3 Récapitulatif des modèles de fluage-diffusion et application au combustible

Les principales caractéristiques des modèles de fluage-diffusion présentés dans les paragraphes précédents sont résumées au tableau 2.1.

Comme mentionné au paragraphe 2.1.2.1, les mécanismes de fluage diffusion sont souvent avancés pour décrire le comportement de l' UO_2 dans le domaine des basses contraintes. En particulier, ces modèles permettent de tenir compte de la dépendance expérimentale de la vitesse de fluage à la contrainte et à la taille de grains.

Les travaux de [Vivant-Duguay 98] montrent que les vitesses de fluage prédites par le modèle de fluage de Nabarro-Herring sont inférieures de plusieurs ordres de grandeurs aux mesures expérimentales. Par ailleurs, l'énergie d'activation associée à ce mécanisme est proche de l'énergie de diffusion aux joints de grains de l'uranium dans UO_2 . De fait, il est généralement admis que le fluage du dioxyde d'uranium est piloté dans le domaine des basses contraintes par un mécanisme de type Coble.

Il nous faut à présent nous intéresser au comportement du combustible dans le domaine des

Modèle	Caractéristiques	Loi constitutive	Ref.
Nabarro- Herring	Diffusion intragranulaire volumique	$\dot{\epsilon} \propto D_{vol} \cdot \sigma \cdot \frac{1}{d^2}$	[Nabarro 48]
Coble	Diffusion aux joints de grains	$\dot{\epsilon} \propto D_{JdG} \cdot \sigma \cdot \frac{1}{d^3}$	[Coble 63]
Ashby et Raj	Couplage diffusion (volumique et joints de grains) + glissement intergranulaire	$\dot{\epsilon} \propto D_{vol} \cdot D_{jdG} \cdot \sigma \cdot \frac{1}{d^2}$	[Raj 71]
Ashby et Verrall	Modèle glissement intergranulaire	$\dot{\epsilon} \propto D_{vol} \cdot D_{jdG} \cdot \sigma \cdot \frac{1}{d^2}$	[Ahsby 73]

TABLE 2.1 – Fluage diffusion - principaux modèles

hautes contraintes, hautes températures, pour lequel le fluage dislocations devient prépondérant, comme nous l'avons vu au paragraphe 2.1.2.1.

Dès lors que le seuil d'ancrage en contrainte des dislocations est atteint, celles-ci se mettent à glisser. La contribution des mouvements de dislocations à la déformation visco-plastique devient alors prépondérante, notamment à hautes températures où les mécanismes de montée par diffusion accélèrent ces mouvements.

2.2.2 Modèles de fluage dislocations

Les modèles dits de fluage dislocations décrivent, comme leur nom l'indique, la déformation de fluage par des mouvements de dislocations. A haute température, ils sont le plus souvent associés à des phénomènes de montée de dislocations par diffusion.

2.2.2.1 Quelques rappels sur les dislocations

Notre objet n'est pas ici de présenter un panorama exhaustif sur la nature des dislocations, mais simplement d'en rappeler brièvement quelques caractéristiques qui nous seront utiles par la suite.

Les dislocations sont des défauts linéiques qui correspondent à une irrégularité dans l'organisation cristalline. Une dislocation est caractérisée par la direction de sa ligne (en vert sur la figure 2.9), qui définit la localisation du défaut, par son vecteur de Burgers (en bleu), qui définit sa propagation par glissement, et par la direction normale au plan de glissement.

Comme illustré à la figure 2.9, il existe deux types de dislocations "idéales" :

- les dislocations vis, pour lesquelles le vecteur de Burgers et la ligne de dislocation sont colinéaires ;
- les dislocations coin, pour lesquelles le vecteur de Burgers est orthogonal à cette ligne.

Bien entendu, cette distinction décrit deux cas extrêmes. Dans la réalité, les dislocations ont généralement un caractère partiel vis / coin.

La figure 2.9 montre aussi que du point de vue du glissement, le caractère vis ou coin de la dislocation n'intervient pas : la connaissance du vecteur \mathbf{l}_s , vecteur unitaire de glissement (colinéaire au vecteur de Burgers) et de \mathbf{n}_s , vecteur normal au plan de glissement, suffit à caractériser le système s . De fait, les indices de Miller sont utilisés pour décrire chaque système de glissement de dislocation sous la forme $\langle \mathbf{l}_s \rangle (\mathbf{n}_s)$ en tenant compte des symétries du cristal.

La déformation plastique du monocristal peut être générée par activation du glissement des dislocations. Pour ce faire, il faut que la contrainte appliquée soit suffisante pour contrecarrer la force de Peierls - Nabarro qui joue le rôle de frottement induit à l'échelle du monocristal.

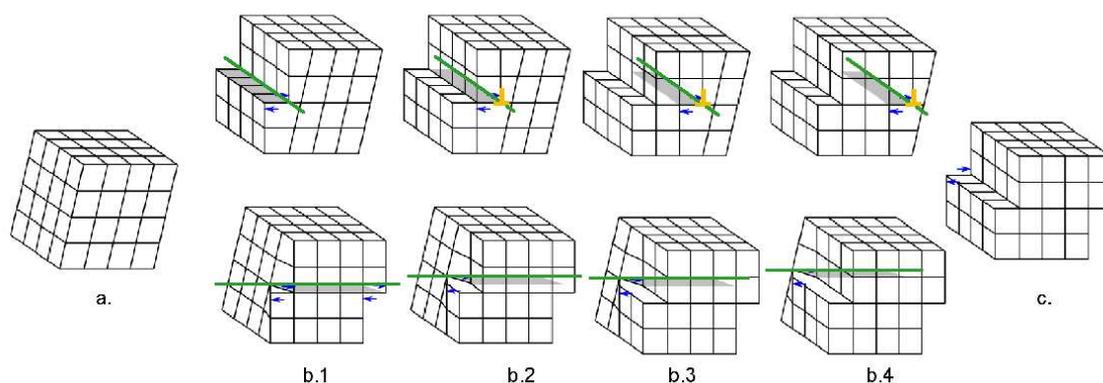


FIGURE 2.9 – Représentation schématique des dislocations coin (ligne du haut) et vis (ligne du bas) dans un cristal cubique : cristal parfait (a.), création et glissement de la dislocation (b.i), cristal déformé (c.)

A haute température, les dislocations peuvent émettre et capter des lacunes par diffusion. Selon les mêmes considérations que les mécanismes de fluage-diffusion, ce phénomène est rendu possible par l'existence d'un champ de contrainte élastique généré au coeur de la dislocation. Ce mécanisme, appelé montée de dislocation, peut permettre à la dislocation de se libérer d'un obstacle ponctuel (un atome interstitiel ou un autre dislocation, par exemple) et contrôle dans le domaine des très hautes températures le mouvement des dislocations comme illustré à la figure 2.10.

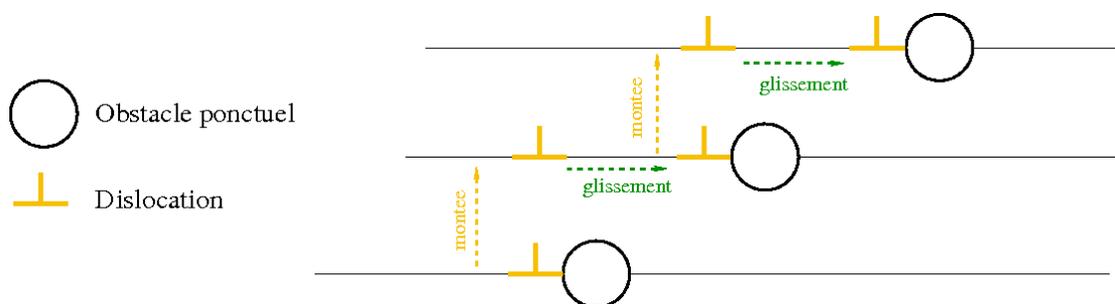


FIGURE 2.10 – Glissement d'une dislocation contrôlé par la montée

Bien entendu, il reste beaucoup à dire sur la phénoménologie des dislocations et les modélisations qui y ont été associées. [François 92] et [Poirier 73], notamment, proposent une revue détaillée du comportement des dislocations du point de vue mécanique. Toutefois, l'essentiel des modèles de fluage dislocations proposés pour la modélisation de l' UO_2 ne s'attache pas à décrire en détail la microstructure du matériau et cette rapide présentation est bien suffisante pour leur compréhension.

Signalons encore que le chapitre 4 sera l'occasion de revenir plus en détail sur les particularités du cristal d' UO_2 , et sur la caractérisation de ses systèmes de glissement de dislocations.

2.2.2.2 Approches macroscopiques du fluage dislocations

Les modèles présentés dans ce paragraphe proposent une description des mouvements de dislocations à haute température d'un point de vue macroscopique, le plus souvent sous la forme d'une loi puissance $\dot{\epsilon} \propto \sigma^n$.

[Weertman 57] propose un mécanisme de glissement des dislocations coins contrôlé par la montée similaire à celui présenté à la figure 2.10. Plusieurs versions successives du modèle ont été proposées par l'auteur, selon la configuration des obstacles. Dans le cas où des dislocations évoluant dans des plans parallèles se bloquent mutuellement en formant des multipôles, le modèle se met sous la forme :

$$\dot{\epsilon} = \frac{D_{vol}}{b^{3.5} M^{0.5}} \left(\frac{\sigma}{\mu} \right)^{4.5} \frac{\mu b^3}{kT} \quad (2.4)$$

avec :

- ▷ M la densité de sources de dislocations ;
- ▷ μ le module de cisaillement élastique du matériau ;
- ▷ b la norme du vecteur de burgers ;
- ▷ D_{vol} le coefficient de diffusion volumique ;
- ▷ k et T respectivement la constante de Boltzmann et la température absolue.

Un autre mécanisme, proposé par [Nabarro 67], considère la déformation par montée pure de dislocations coins. Ce modèle est en réalité une extension du fluage-diffusion de Nabarro-Herring en considérant cette fois les dislocations comme puits et sources de lacunes. Le caractère incompressible de la déformation est assuré par le fait que les lacunes sont échangées entre dislocations, comme illustré à la figure 2.11. Comme pour le modèle de Weertman, ce modèle fait intervenir le coefficient de diffusion volumique du matériau D_{vol} .

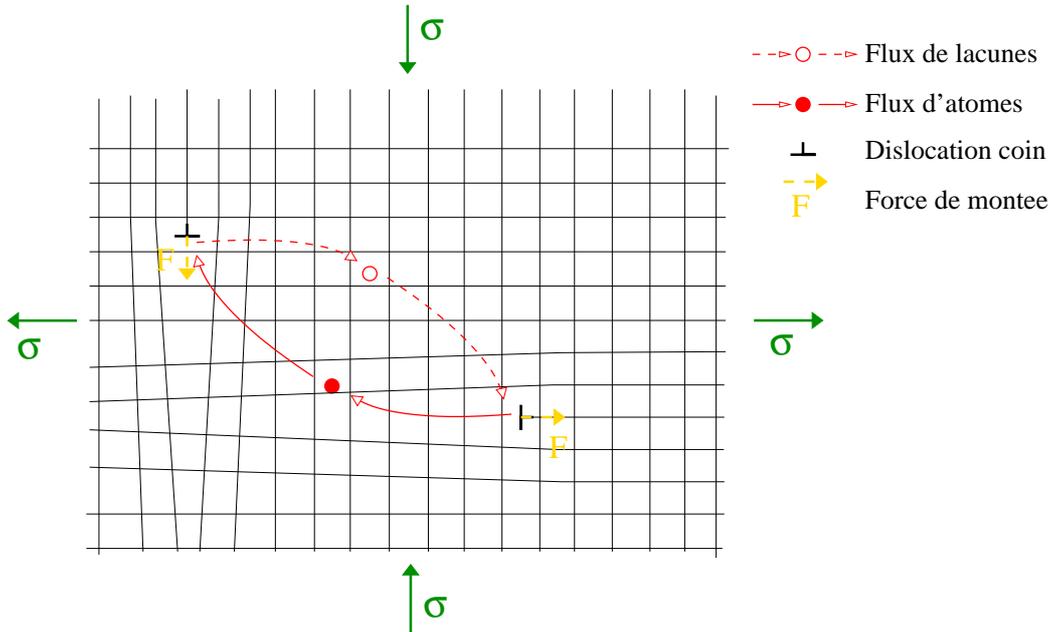


FIGURE 2.11 – Fluage par montée pure de dislocations coins : modèle de [Nabarro 67]

Enfin, citons encore [Barrett 65] qui développe un modèle de déformation due au glissement des dislocations vis freinées par une “force chimique” générée par la présence de crans à la jonction entre dislocations dans le monocristal. La particularité de cette loi est qu’elle ne s’exprime plus sous la forme d’une loi puissance $\dot{\epsilon} \propto \sigma^n$, mais d’un sinus hyperbolique.

Il existe encore d’autres modèles de fluage dislocations, qui se différencient de ceux présentés ici principalement par la configuration des obstacles rencontrés par les dislocations. Toutefois, cette rapide présentation permet de cerner les principales caractéristiques des modèles envisagés

pour la simulation du comportement de l'UO₂ dans le domaine des hautes températures et hautes contraintes.

2.2.2.3 Récapitulatif des modèles de fluage-dislocation et application du combustible

Les principales caractéristiques des modèles de fluage dislocations présentés dans les paragraphes précédents sont résumées au tableau 2.2.

Modèle	Caractéristiques	Loi constitutive	ref
Weertman	Montée (respectivement annihilation) des dislocations coins	$\dot{\epsilon} \propto \sigma^{4.5}$ ou σ^3 resp.	[Weertman 57]
Nabarro	Montée des dislocations coins contrôlée par la diffusion	$\dot{\epsilon} \propto D_{vol} \cdot \sigma^3$	[Nabarro 67]
Barret et Nix	Glissement des dislocations vis freinées par une force chimique	$\dot{\epsilon} \propto D_{vol} \cdot \sigma^3 sh(\sigma)$	[Barrett 65]

TABLE 2.2 – Fluage dislocations - principaux modèles

Concernant l'UO₂, il est généralement admis que le régime de fluage-dislocation est associé à un mécanisme de glissement des dislocations contrôlé par le franchissement d'obstacles par montée [Dherbey 00]. Le modèle de plasticité cristalline décrit au paragraphe 4.2 sera l'occasion d'aborder le comportement des dislocations dans le combustible de façon plus détaillée.

Un certain nombre de mécanismes de déformation envisagés pour le combustible ont été décrits au cours de cette section. Il nous reste maintenant à définir les gammes de sollicitations pour lesquels ces mécanismes sont actifs.

2.2.3 Cartes de mécanismes de déformation

Plusieurs mécanismes de fluage ont été décrits dans les paragraphes précédents ; il s'agit maintenant de mettre en évidence leurs zones d'influences respectives. Ceci peut être fait par la définition de la contrainte de transition ou par l'utilisation de cartes de mécanismes de déformation.

2.2.3.1 Contrainte de transition

Comme nous l'avons vu au paragraphe 2.1.2, il est généralement admis que fluage de l'oxyde d'uranium est régi par deux processus de contrôle de $\dot{\epsilon}$: le fluage-diffusion $\dot{\epsilon}_{dif}$ et le fluage-dislocation $\dot{\epsilon}_{dislo}$. Le passage d'un domaine à l'autre est caractérisé par la contrainte de transition σ_t pour laquelle la participation des deux processus est équivalente par définition, soit $\dot{\epsilon}_{dif} = \dot{\epsilon}_{dislo}$. D'après la loi générale de fluage (2.2), la valeur de cette contrainte de transition est donc donnée par :

$$\sigma_t = \left(\frac{A_1}{A_2} \right)^{\frac{1}{n_2 - n_1}} \exp \left[\frac{(Q_2 - Q_1)}{(n_2 - n_1) RT} \right] \quad (2.5)$$

On a donc :

- $\sigma < \sigma_t \rightarrow \dot{\epsilon} \propto \sigma^{n_1}$ avec $n_1 = 1$;
- $\sigma > \sigma_t \rightarrow \dot{\epsilon} \propto \sigma^{n_2}$ avec $n_2 \in [4; 7]$.

2.2.3.2 Cartes de mécanismes de déformation

La notion de contrainte de transition s'avère délicate à manier dans la mesure où sa définition (théorique) est faite au niveau macroscopique : il est peu probable que pour un niveau de contrainte donné, les mécanismes de déformation soient les mêmes dans tous les grains du polycristal. En particulier, σ_t dépend de la température et de la taille de grain ; toutes ces limitations font que pour résumer les différents mécanismes de déformation et leur zone d'influence respective, on utilise plus souvent un diagramme appelé carte des mécanismes de déformation ou carte d'Ashby et Frost [Ashby 82].

Ces cartes se présentent sous deux formes (voir figure 2.12) :

- Tracé de courbes iso- $\dot{\epsilon}$ dans un diagramme Contrainte - Température ;
- Tracé de courbes iso- $\dot{\epsilon}$ dans un diagramme Taille de grains - Contrainte.

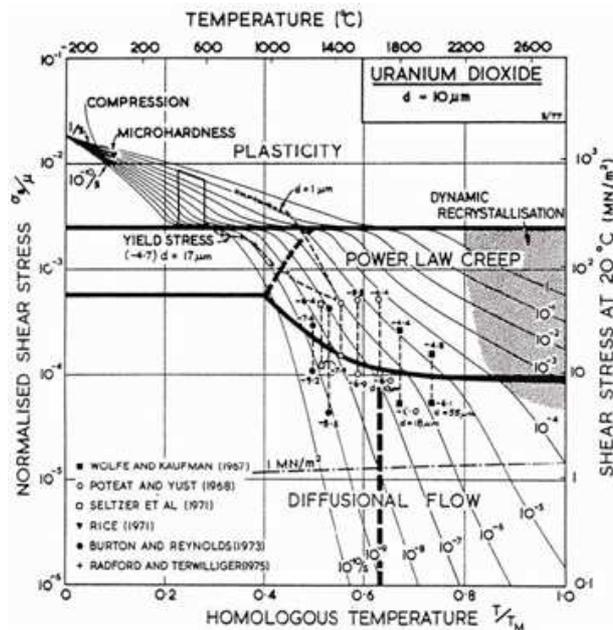


FIGURE 2.12 – Carte des mécanismes de fluage pour l'oxyde d'uranium [Ashby 82]

Elles sont obtenues par un processus de calcul itératif qui vise à corréler données expérimentales et modèles théoriques. Les frontières entre deux mécanismes sont définies par la gamme de sollicitations pour laquelle la déformation associée à chacun des deux mécanismes est égale à l'autre.

Cette carte permet de hiérarchiser les différents mécanismes de fluage considérés pour une gamme de sollicitation donnée. La section suivante s'attachera à décrire la loi développée par Gatt et Monerie pour la simulation du fluage thermique stationnaire de l'UO₂ (utilisée dans la plateforme PLEIADES), qui traite l'ensemble des mécanismes de déformation visco-plastique du combustible et le basculement d'un mécanisme à l'autre avec un formalisme sensiblement différent.

2.2.4 Fluage et irradiation

Comme nous l'avons vu au paragraphe 2.1.3, le comportement viscoplastique de l'UO₂ est affecté sous irradiation. Cet effet peut se mettre sous la forme :

$$\dot{\epsilon}^{an} = \dot{\epsilon}^{irr} + \dot{\epsilon}_{\dot{F}=0}^{vp} (1 + c\dot{F}) \quad (2.6)$$

avec :

- ▷ $\dot{\epsilon}^{irr}$ le fluage induit par l'irradiation ;
- ▷ $\dot{\epsilon}_{\dot{F}=0}^{vp}$ le fluage thermique dans le combustible ;
- ▷ \dot{F} le taux de fissions ;
- ▷ c un coefficient d'accélération.

Nous allons maintenant décrire plus en détail ces termes et leur origine physique.

2.2.4.1 Fluage induit par irradiation

Le fluage induit par irradiation a été introduit au paragraphe 2.1.3. Il se signale principalement par la dépendance linéaire à la contrainte et par son caractère athermique. Un modèle a été proposé par [Chapron 97] sous la forme :

$$\dot{\epsilon}^{irr} = 5.1944 * 10^{-24} \sigma \dot{F} \exp \left[-\frac{8100}{RT} \right] \quad (2.7)$$

traduisant un mécanisme de déformation induit par une réorganisation du réseau cristallin autour d'une pointe de fission, où la température atteinte est proche de celle de fusion du combustible. Plus récemment, [Gatt 05] a développé un modèle homogénéisé tenant compte d'une phase purement élastique et d'une phase viscoplastique de dimensions réduites au voisinage des pointes de fission.

2.2.4.2 Effet "coopératif" et accélération du fluage thermique

[Brucklacher 72] a associé l'effet d'accélération du fluage thermique sous irradiation à la génération de défauts ponctuels par les pointes de fission.

Pour les modèles de fluage-diffusion présentés précédemment, ceci revient à considérer que les joints de grains ne sont plus les seules sources ou puits de lacunes. Le coefficient d'accélération peut alors être intégré au coefficient de diffusion D_v du combustible sous la forme :

$$D_v^f = (1 + c\dot{F})D_v \quad (2.8)$$

Les essais expérimentaux n'ont pas pu conclure sur la présence éventuelle d'un effet coopératif dans le régime de fluage dislocations. Il est pourtant légitime de penser [Sauter 01] que les pointes de fissions vont d'une part faciliter la montée des dislocations par diffusion, et d'autre part générer de nouvelles dislocations. Nous reviendrons sur ce point précis à l'occasion du paragraphe 4.3.4.

2.3 Loi Gatt-Monerie

La loi développée par Gatt et Monerie ([Monerie 06]), à laquelle nous nous référerons par la suite sous le nom de loi Gatt-Monerie, est une loi poro-élasto-visco-plastique qui permet la description du fluage du combustible à une échelle "mésoscopique". Cette loi, validée sur un grand nombre d'essais expérimentaux, sera prise comme loi de référence pour la validation du comportement viscoplastique effectif du modèle polycristallin développé dans les chapitres suivants.

La description des différents mécanismes de déformation inélastique du combustible retenus dans la loi Gatt-Monerie repose sur l'utilisation de potentiels elliptiques macroscopiques Ψ_i sous la forme générale :

$$\epsilon = \frac{\partial \Psi_i}{\partial \sigma} \quad (2.9)$$

La loi Gatt-Monerie permet par ailleurs, comme nous le verrons dans les paragraphes suivants, de tenir compte de la porosité du combustible mentionnée au paragraphe 1.2.

2.3.1 Modélisation du fluage thermique stationnaire

Le fluage stationnaire de l'UO₂ est décrit par le potentiel Ψ_s , qui s'écrit :

$$\Psi_s = (1 - \theta) \Psi_1 + \theta \Psi_2 \quad (2.10)$$

où :

- ▷ Ψ_1 est le potentiel associé au fluage-diffusion ;
- ▷ Ψ_2 est le potentiel associé au fluage-dislocation ;
- ▷ θ est la fonction de couplage qui régit le passage d'un mécanisme de fluage à l'autre.

La description des potentiels Ψ_1 , Ψ_2 et de la fonction de fluage fera l'objet de la suite de ce paragraphe.

2.3.1.1 Potentiels associés aux mécanismes de fluage thermique stationnaire

Le potentiel macroscopique Ψ_i associé à chacun des deux mécanismes de fluage thermique stationnaire (diffusion et dislocations) est écrit en décomposant le comportement du combustible sous la forme d'une matrice viscoplastique incompressible d'une part, et d'une fraction volumique f de pores d'autre part.

$$\Psi_i(f, n, \boldsymbol{\sigma}) = \frac{K_i(d, T)}{n + 1} \left[\frac{9}{4} A_i(f, n) \left(\frac{\sigma_m}{\sigma_0} \right)^2 + B_i(f, n) \left(\frac{\sigma_{eq}}{\sigma_0} \right)^2 \right]^{(n+1)/2} \quad (2.11)$$

avec :

- ▷ $\sigma_m = \frac{1}{3} Tr(\boldsymbol{\sigma})$ la contrainte hydrostatique ;
- ▷ $\sigma_{eq} = \sqrt{\frac{3}{2} \boldsymbol{\sigma}^d : \boldsymbol{\sigma}^d}$ la contrainte équivalente de Von Mises ;
- ▷ f la fraction volumique en porosité ;
- ▷ K_i paramètre dépendant de la taille de grains et de la température.
- ▷ A_i et B_i deux fonctions de la porosité, choisis de telle sorte que $A_i(0) = 0$ (de façon à garantir un comportement incompressible en l'absence de porosité) et $B_i(0) = 1$ (le comportement est identique à celui de la matrice).

Dans le cas du fluage diffusion, l'exposant n est pris égal à 1, ce qui permet de retrouver la dépendance linéaire de la vitesse de fluage à la contrainte proposée par l'essentiel des modèles de fluage-diffusion décrits au paragraphe 2.2.1. Notons par contre que pour le fluage dislocations, l'identification sur une large gamme d'essais expérimentaux a permis de figer la valeur de l'exposant à $n = 8$, ce qui est bien supérieur aux valeurs proposées généralement pour ce type de mécanisme.

2.3.1.2 Fonction de couplage

La fonction de couplage θ permet de contrôler le passage d'un mécanisme de fluage thermique stationnaire à l'autre en fonction de la gamme de sollicitations considérée, de façon analogue à la contrainte de transition définie à l'équation (2.5) à partir des cartes de mécanismes de déformation de Ashby. Une première expression $\theta = \theta_0$ dite "statique" a été proposée :

$$\theta_0(T, \boldsymbol{\sigma}) = \frac{1}{2} \left(1 + \tanh \left(\frac{T - \bar{T}(f, \boldsymbol{\sigma})}{h} \right) \right) \quad (2.12)$$

où $\bar{T}(f, \sigma)$ est la température de transition entre les deux mécanismes, et h un paramètre à déterminer. Cette fonction de couplage statique permet de modéliser le basculement entre les deux régimes de fluages déjà décrit au paragraphe 2.1.2.1.

Une deuxième formulation, dite “fonction de couplage dynamique” a toutefois été développée sous la forme :

$$\dot{\theta} = \frac{1}{\tau} \frac{(\theta_0 - \theta)^2}{\theta_0} \quad (2.13)$$

où θ_0 est la fonction de couplage statique définie précédemment, et $\tau = \tau(d)$ prend en compte une dépendance à la taille de grain observée expérimentalement. Cette formulation “dynamique” de la fonction couplage agit comme un retard de l’activation du fluage-dislocation et permet de représenter le pic de compression décrit au paragraphe 2.1.2.

Bien que cette modélisation permette de rendre compte du fluage thermique stationnaire de l’UO₂, des enrichissements ultérieurs ont été apportés au modèle pour simuler plus fidèlement le comportement du combustible.

2.3.1.3 Enrichissements du modèle

La loi Gatt-Monerie a été complétée pour tenir compte du fluage primaire du combustible, déjà mentionné au paragraphe 2.1.2, et des déformations induites par l’irradiation. Ces ajouts au modèle ont été écrits sous la forme de potentiels elliptiques, conformément à l’approche présentée à l’équation 2.9.

Le fluage primaire correspond à l’écrouissage par réorganisation interne du matériau observé expérimentalement dans le cas du combustible. Une loi d’écrouissage multiplicatif de type Lemaître [Lemaître 85] a été utilisée pour décrire le potentiel macroscopique Ψ_p associé à ce mécanisme :

$$\Psi_p = \frac{K(T, d) \sigma_{eq}^{a+1}}{a+1} \frac{1}{\varepsilon_{eq}^b} \quad (2.14)$$

avec :

- ▷ $\varepsilon_{eq} = \sqrt{\frac{2}{3} \varepsilon_{vp}^d : \varepsilon_{vp}^d}$ la déformation viscoplastique équivalente ;
- ▷ a et b deux constantes du modèle.

L’irradiation se manifeste quant à elle de deux manières. Un potentiel macroscopique supplémentaire Ψ_i attaché au fluage par irradiation est introduit dans le modèle :

$$\Psi_i = \frac{K_i(T)}{2} \sigma_{eq}^2 \quad (2.15)$$

où K_i est comme précédemment un terme d’activation thermique de ce mécanisme de déformation. Par ailleurs, l’irradiation provoque une accélération du fluage thermique du combustible. Soit F le taux de fission du matériau, nous obtenons finalement :

$$\Psi_{tot} = \Psi_i + (1 + kF) (\Psi_p + \Psi_s) = \Psi_i + (1 + kF) [\Psi_p + (1 - \theta) \Psi_1 + \theta \Psi_2] \quad (2.16)$$

avec k un coefficient constant. Ce modèle permet donc de prendre en compte une grande variété de mécanismes de déformations observés pour l’UO₂. Afin de décrire complètement la loi Gatt-Monerie, il nous reste encore à présenter le jeu d’équations qui régit l’évolution de la porosité.

2.3.2 Traitement de la porosité

Dans la loi Gatt-Monerie, la porosité intervient dans les mécanismes de fluage du combustible à travers la fraction volumique f . En réécrivant la définition de cette fraction volumique, nous obtenons :

$$f = \frac{V_p}{V} = 1 - \frac{V_m}{V} \quad (2.17)$$

avec V , V_p et V_m respectivement le volume total de matériau, le volume total de pores et le volume de matrice incompressible. Par dérivation, il vient :

$$\dot{f} = (1 - f) \left[tr(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}) - \frac{\dot{V}_m}{V_m} \right] \quad (2.18)$$

avec $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}$ le taux de déformation total du matériau. En négligeant les déformations élastiques, et en introduisant par ailleurs $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_d$ et $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{gg}$, déformations associées respectivement à la densification et au gonflement gazeux dans le combustible, nous pouvons finalement écrire :

$$\dot{f} = (1 - f) tr(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{vp}) + tr(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{gg}) + tr(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_d) \quad (2.19)$$

Le traitement de la porosité est l'une des principales améliorations apportées par rapport aux modèles existants précédemment, puisque l'évolution de la fraction volumique de porosité permet de rendre compte du changement de volume du combustible.

Des travaux plus récents ont été réalisés pour une modélisation plus complète des porosités dans l'UO₂. [Vincent 07] propose un modèle élastoplastique endommageable pour une céramique à deux population de pores : les pores intragranulaires de forme sphérique et les pores intergranulaires de forme ellipsoïdale. Une distinction entre pores et bulles intragranulaires est réalisée dans [Julien 08], en faisant appel à un composite linéaire de comparaison à N couches.

Ces différents modèles ont permis d'enrichir significativement les codes de simulation du comportement du combustible en irradiation. Le paragraphe qui suit sera l'occasion de voir comment ces travaux s'intègrent dans ALCYONE, l'application du projet PLEIADES dédiée au comportement des crayons combustibles REP.

2.4 Modélisation du combustible UO₂ en réacteur

Les paragraphes précédents ont été consacrés à une revue des travaux menés pour la caractérisation et la modélisation du combustible UO₂ du point de vue thermo-mécanique. Nous allons maintenant nous intéresser plus particulièrement à la manière dont cette modélisation est traitée dans le cadre d'ALCYONE.

2.4.1 Modélisation mécanique de l'UO₂ sous irradiation

ALCYONE fait appel à la méthode des éléments finis pour simuler le comportement du crayon combustible. Différentes représentations du crayon ont été développées, dont les degrés de sophistication permettent de répondre au niveau de précision souhaité par le modélisateur. Dans cette section nous nous intéresserons plus en détail à la modélisation 1D, qui sera utilisée au chapitre 9 dans le cadre de la validation de notre modèle d'agrégat polycristallin.

2.4.1.1 Modélisation 1D du crayon combustible

La géométrie du crayon combustible présente une symétrie de révolution qui se prête à une modélisation axisymétrique. La modélisation 1D réalisée dans ALCYONE est construite en trois étapes, comme illustré à la figure 2.13 :

- le crayon est divisé en “tranches” axiales contenant chacune une ou plusieurs pastilles (voir figure 2.13. a) ;
- le comportement de chaque tranche est modélisé par une approche 1D-axisymétrique dans laquelle le combustible et la gaine sont chacun représentés par un segment de droite (voir figure 2.13. b) ;
- le couplage entre les différentes tranches est assuré par le calcul de la pression interne dans le crayon et par le bilan axial des forces.

Du fait de ce couplage, le terme de modélisation 1,5D est parfois utilisé.

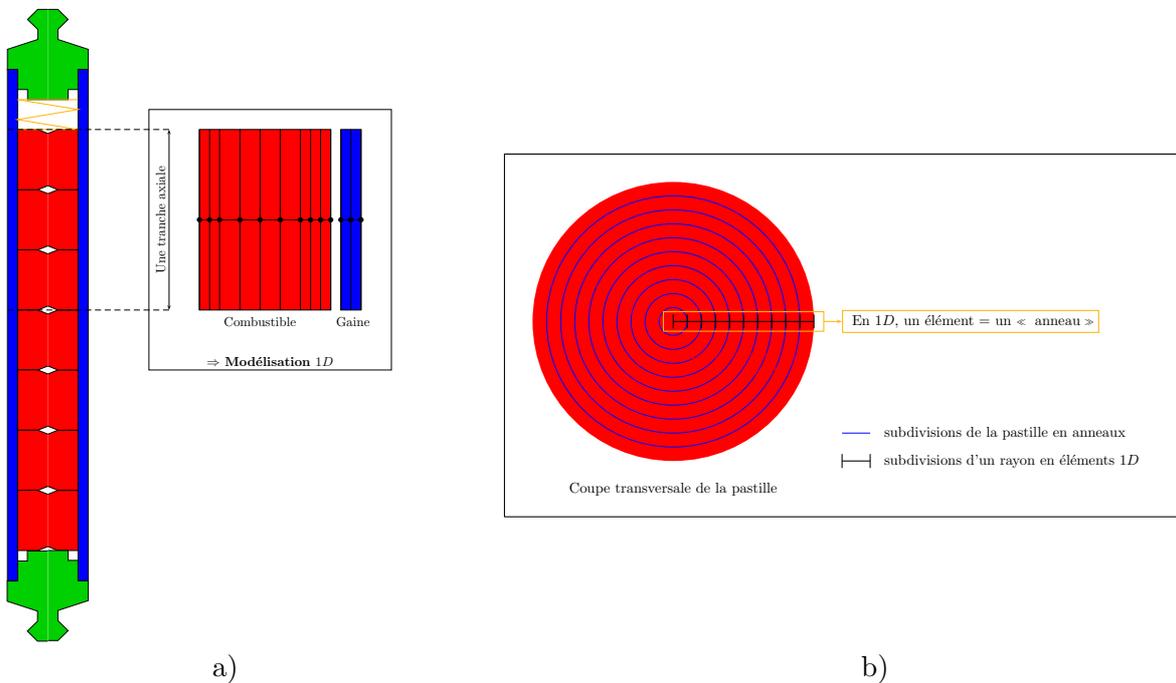


FIGURE 2.13 – Modélisation 1D du crayon combustible. a) Découpage du crayon en tranches axiales. b) Equivalence entre un élément fini 1D et une structure. [Helfer 06]

Du fait de la symétrie de révolution de chaque tranche, nous pouvons écrire en tout point :

$$u_\theta = 0 \text{ et } \varepsilon_{r\theta} = 0 \quad (2.20)$$

Par ailleurs, la non rotation de la tranche entraîne de même $\varepsilon_{\theta z} = 0$. Enfin, le modèle fait appel à une hypothèse de déformations planes généralisées, ce qui signifie que la déformation axiale est constante pour tous les noeuds du crayon combustible et de la gaine. Soient \mathbf{e}_r et \mathbf{e}_z les vecteurs unitaires dans la direction radiale et axiale respectivement, le champ de déplacement admissible peut alors se mettre sous la forme :

$$\mathbf{u}(r, \theta, z) \approx u(r)\mathbf{e}_r + \varepsilon_{zz}.z\mathbf{e}_z \quad (2.21)$$

Dans le cadre de cette modélisation, la loi viscoplastique LPCC développée par [Sladkoff 99] est préférée à la loi Gatt-Monerie présentée au paragraphe 2.3. Cette loi peut s'écrire sous la forme :

$$\dot{\epsilon}_{fl} = \min(\max(\dot{\epsilon}_{fl_1}, \dot{\epsilon}_{fl_2}), \dot{\epsilon}_{fl_3}) \quad (2.22)$$

avec :

- ▷ $\dot{\epsilon}_{fl_i} = A_i \cdot d^{m_i} \cdot \sigma_{eq}^{n_i} \cdot e^{k_i \cdot p} \cdot e^{-\frac{Q_i}{RT}}$ pour $i = [1 : 3]$;
- ▷ A_i , m_i , n_i , k_i et Q_i des paramètres déterminés expérimentalement ;
- ▷ d , p et T respectivement la taille de grain, la porosité et la température.

Les deux cas $i = 1$ et $i = 2$ correspondent respectivement au fluage-diffusion et au fluage dislocations déjà présentés précédemment. Un cas limite ($i = 3$) est ajouté pour régulariser la loi de comportement dans le domaine des hautes contraintes. Notons que contrairement à la loi Gatt-Monerie, ce modèle de comportement ne tient pas compte de l'évolution de la porosité et du changement de volume du combustible qui y est associé.

Ce paragraphe s'est principalement concentré sur la description du combustible dans l'approche 1D proposée par ALCYONE. Une présentation plus complète de cette modélisation 1D est donnée dans [Garcia 01] et [Garcia 02]. Bien que les hypothèses formulées sur la géométrie et le champ de déplacement admissible permettent de réduire les temps de calcul, d'autres représentations du crayon ont été développées pour mieux rendre compte de son comportement.

2.4.1.2 Modélisations 2D et 3D du combustible

Nous présentons dans cette section les modélisations 2D et 3D du combustible développées dans ALCYONE.

L'approche 2D retenue consiste à ne considérer qu'une pastille et la portion de gaine qui lui fait face. Cette nouvelle géométrie permet de représenter l'évidement central de la pastille ainsi que le chanfrein.

La symétrie de révolution, déjà mentionnée précédemment, incite à adopter une description axisymétrique du problème. Toujours selon des motifs de symétrie, seule une moitié de la section axiale de la pastille est représentée, comme illustré à la figure 2.14 : le plan inter-pastilles est considéré comme fixe au cours du temps par hypothèse, tandis que l'hypothèse de symétrie du cristal implique d'imposer l'uniformité du déplacement axial du plan médian pastille.

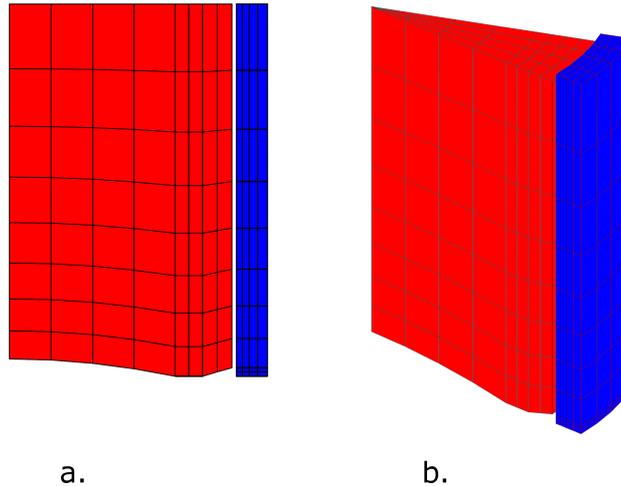


FIGURE 2.14 – Modélisation 2D (a.) et 3D (b.) du combustible dans ALCYONE[Helfer 06]

La représentation 3D, illustrée à la figure 2.14, se concentre quant à elle sur la modélisation d'un fragment de pastille. Cette représentation présuppose donc de la fissuration de la pastille dans les directions radiales et axiales. Par rapport à l'approche bidimensionnelle, elle permet de

décrire le comportement orthoradial du fragment.

Nous nous sommes pour l'instant concentrés sur les différentes modélisations envisagées pour le comportement thermo-mécanique de la pastille combustible. Comme nous l'avons vu au paragraphe 1.2, de nombreux phénomènes liés notamment à l'irradiation provoquent une évolution de la microstructure de l' UO_2 qui doit elle aussi être prise en compte pour la simulation.

2.4.2 Prise en compte de l'évolution de la microstructure

Tous les développements présentés dans ce chapitre ont pour vocation de décrire le comportement thermomécanique de l' UO_2 sous irradiation. Il convient à présent de nous repositionner dans une démarche plus globale pour prendre en compte l'ensemble des phénomènes dont le combustible irradié est le siège.

2.4.2.1 Comportement des gaz de fission en transitoire de puissance

Nous nous intéressons ici à l'évolution des différentes populations gazeuses (gaz dissous, bulles, porosités de fabrication) dans le combustible, telle qu'elle est décrite par le modèle MARGARET [Noirot 06]. La bonne compréhension de ces phénomènes, réunis sous le terme de physico-chimie, est capitale pour simuler la densification de la pastille ainsi que le gonflement gazeux, lesquels impactent le comportement mécanique de l' UO_2 à travers l'équation (2.19).

Typiquement, ce problème est traité à travers un modèle de "grain moyen", illustré à la figure 2.15. Par hypothèse, la géométrie du grain est choisie sphérique. Par ailleurs, et pour tenir compte du comportement des grains en surface de la pastille, une partie de la surface du grain est considérée comme "libre", c'est-à-dire à la frontière du plenum.

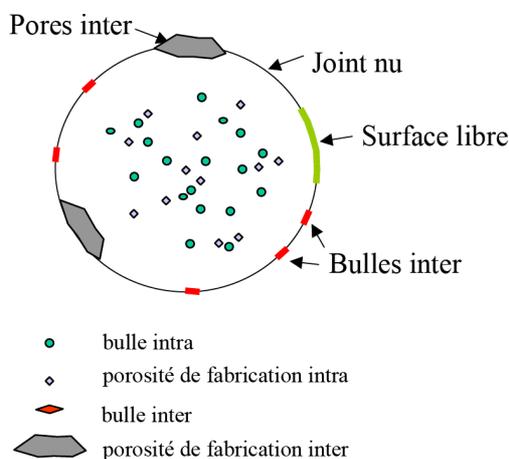


FIGURE 2.15 – Schéma de la microstructure du combustible dans MARGARET [Noirot 06]

Dans le cas du grain dans son état classique³, MARGARET permet de prendre en compte :

- la création du gaz de fission, initialement dissous dans le réseau cristallin ;
- l'échange entre le gaz en solution et le joint de grain ;
- la nucléation et la croissance de bulles intragranulaires ;
- la coalescence des bulles intragranulaires ;
- le mouvement des cavités intragranulaires vers le joint de grain ;

3. Nous n'aborderons pas ici la notion de matériau restructuré pour les forts taux de combustion, dont l'évolution est décrite plus en détail dans [Noirot 05]

– l'interconnexion puis la percolation de bulles inter vers les volumes libres.

Ces différentes interactions sont résumées à la figure 2.16. L'évolution du système est pilotée par un système d'équations différentielles couplées qui décrit l'ensemble des phénomènes en termes de concentrations, de quantité de gaz présent dans chaque phase, de nombre et de volume des cavités. Sans rentrer plus dans le détail du formalisme retenu, notons que les équations (2.23) et (2.24) qui régissent respectivement la croissance des bulles intra- et intergranulaires se mettent sous la forme :

$$\frac{\partial V_{bi}}{\partial t} = 4\pi R_{bi} C_{bi} D_U \left[\exp\left(\frac{-P_H \Omega}{k_B T}\right) - \exp\left(\frac{-(P_{int} - \frac{2\gamma}{R_{bi}})\Omega}{k_B T}\right) \right] \quad (2.23)$$

$$\frac{\partial V_{bj}}{\partial t} = \frac{2\pi\Omega D_{Uj} w}{k_B T} \left(-P_H + P_{int} - \frac{2\gamma}{r_{bi}}\right) f(F_C) \quad (2.24)$$

avec :

- ▷ V_{bi} et V_{bj} les volumes de bulles intragranulaires (i) et aux joints (j) de grains (de rayon R_{bi} et r_{bi}) respectivement ;
- ▷ D_U et D_{Uj} respectivement le coefficient de diffusion des cations intra et intergranulaire ;
- ▷ Ω le volume atomique ;
- ▷ C_{bi} le nombre de bulles intragranulaires ;
- ▷ γ l'énergie de surface d'une bulle ;
- ▷ w l'épaisseur du joint de grain, considérée comme un paramètre fixe du problème ;
- ▷ $f(F_C)$ une fonction croissante du taux de couverture des joints de grain F_C ;
- ▷ k_B et T la constante de Boltzmann et la température absolue respectivement ;
- ▷ P_{int} et P_H la pression interne des bulles et la pression hydrostatique respectivement.

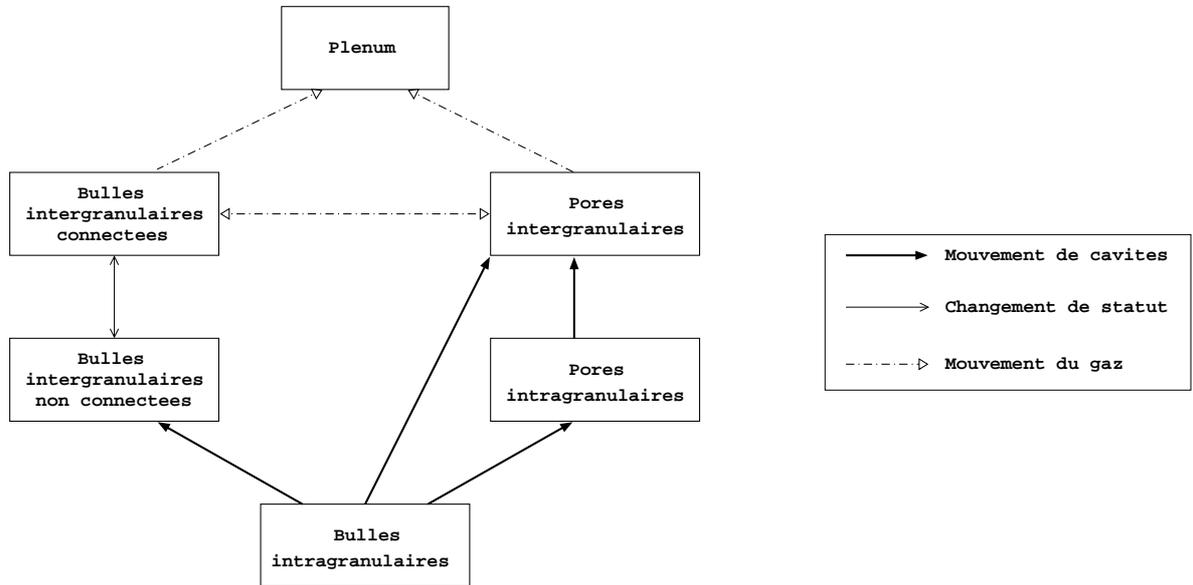


FIGURE 2.16 – Représentation schématique des transferts de gaz entre les différentes localisations possibles du gaz selon MARGARET[Julien 08]

La contrainte appliquée en peau interne P_{int} des bulles est calculée via une équation d'état de type VAN DER WAALS. L'apparition de la pression hydrostatique P_H dans les équations (2.23) et (2.24) permet de coupler le comportement mécanique de l'UO₂ avec l'évolution de sa microstructure. Les grandes lignes de ce couplage seront décrites dans le paragraphe qui suit.

2.4.2.2 Couplage entre les différents domaines de la physique du combustible

Deux types de modèles ont été présentés dans les paragraphes précédents :

- les modèles thermo-mécaniques, qui simulent le comportement du combustible à l'échelle macroscopique (typiquement l'échelle de la pastille) ;
- les modèles physico-chimiques, qui déterminent l'évolution des gaz de fission à l'échelle microscopique (l'échelle du grain, en l'occurrence).

Notons que dans le cas de ces derniers, on peut parler de modèle “point” résolu localement et pour lequel aucune information sur la géométrie de la structure n'intervient : la résolution se fait en chaque noeud du maillage par éléments finis macroscopique du modèle mécanique.

Comme illustré à la figure 2.17, le couplage se fait à travers la pression hydrostatique, calculée en chaque noeud du maillage et qui intervient comme nous l'avons vu dans la loi de croissance des bulles intra- et intergranulaires. Une déformation de gonflement gazeux est définie comme le rapport volumes de bulles / volume de combustible “frais”, et est imposée comme déformation libre pour le calcul mécanique.

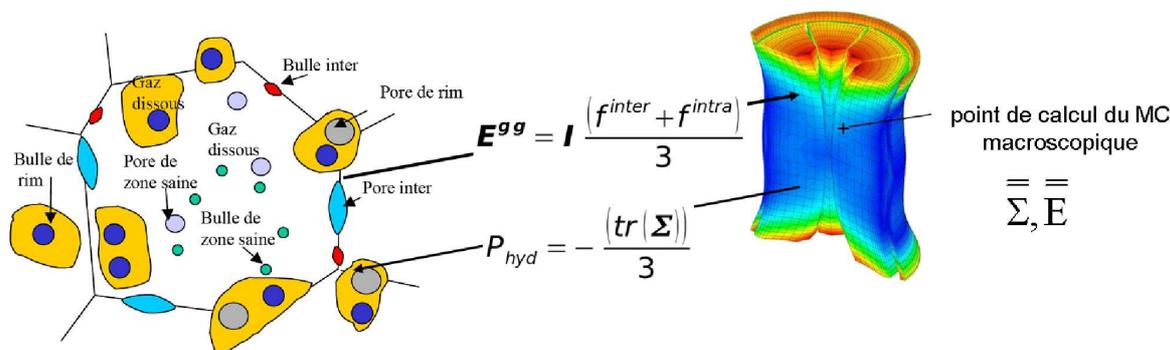


FIGURE 2.17 – Représentation schématique du couplage entre modèle thermo-mécanique macroscopique et modèle de physico-chimie à l'échelle du grain

Différents algorithmes de couplage numérique ont été envisagés pour assurer l'interaction entre la mécanique et la physico-chimie, allant du simple chainage à un véritable couplage itératif, pour lequel un critère de convergence est défini sur les grandeurs d'échange, pression hydrostatique et gonflement gazeux. Une description plus détaillée de ce couplage est donnée dans [Michel 11].

2.4.3 Conclusions : les limites de l'approche multi-échelles

Cette section a permis de décrire successivement la modélisation thermo-mécanique du combustible développée dans ALCYONE, le modèle MARGARET pour le comportement des gaz de fission et la manière dont ces modèles sont couplés pour la simulation du crayon combustible.

Cette approche multi-échelles de l' UO_2 permet de tenir compte de toute la richesse des phénomènes présents lors de l'irradiation dans un cadre de calcul de structure. Toutefois, la notion même de transition d'échelle implique un certain nombre d'hypothèses dont la validité peut être questionnée. L'hypothèse de “grain moyen” d' UO_2 qui permet de passer du problème mécanique macroscopique au problème de transport des produits de fission (décrit à l'échelle du grain) est sans doute la plus évidente.

La principale dichotomie réside dans la manière dont le transport des produits de fission est modélisé à l'échelle du grain, alors que la modélisation mécanique du combustible ne tient pas compte des hétérogénéités liées à sa microstructure. Les différents mécanismes de fluage proposés au

paragraphe 2.2 dépendent en toute rigueur des propriétés microstructurales de l'UO₂ : la diffusion de lacune est dépendante de la forme des grains, les mouvements de dislocations de leurs propriétés de symétrie, etc. La figure 2.18, qui présente l'état de surface des grains en surface de pastille, montre par exemple que le comportement mécanique des grains est fortement tributaire de leurs orientations cristallines.

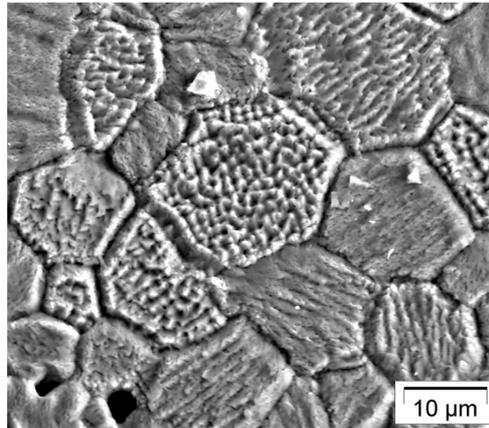


FIGURE 2.18 – Surface d'un évidement en extrémité de pastille, mise en évidence de l'évolution de la surface des grains sous irradiation et de la différence de cette évolution suivant l'orientation cristalline

De même, les structures de dislocations observées par [Alamo 78] ou les décohésions intergranulaires mesurées dans [Dherbey 00] (et sur lesquelles nous reviendrons à l'occasion du chapitre 4) ne peuvent être prises en compte qu'en moyenne dans le cadre d'une modélisation macroscopique du comportement mécanique de l'UO₂.

L'amélioration des modèles existants passe donc par la compréhension du couplage entre les différents domaines de la physique à l'échelle polycristalline, à laquelle est dédiée ce travail de thèse. L'enjeu de cette étude est double :

- tout d'abord proposer une description du comportement thermo-mécanique de l'UO₂ à l'échelle de l'agrégat polycristallin, de façon à gagner en cohérence avec les modèles de physico-chimie. Ceci implique à la fois de se doter d'une représentation du polycristal la plus fidèle possible sur le plan morphologique, et d'une modélisation des mécanismes de fluage intégrant toute l'information disponible sur la microstructure du combustible. L'ensemble de ces développements fera l'objet de la deuxième partie de ce mémoire ;
- analyser la réponse du modèle d'agrégat à différentes sollicitations thermo-mécaniques. Nous analyserons au cours des troisième et quatrième partie, les distributions de contraintes locales dans le polycristal, de façon à débattre de la validité de l'approche actuelle du couplage multiphysique et de l'influence du comportement micromécanique de l'UO₂ sur le comportement des gaz de fission.

Plus précisément, la troisième partie de ce mémoire sera principalement consacrée à la définition des grandeurs locales étudiées et à la sensibilité numérique du modèle, tandis que la quatrième partie se concentrera sur des éléments de validation et sur la réponse du modèle polycristallin à différentes sollicitations représentatives d'un essai de compression uniaxiale, puis d'une irradiation en rampe de puissance.

Il nous faut ici souligner que ce modèle d'agrégat polycristallin a principalement une vocation exploratoire, et est destiné à améliorer la compréhension des phénomènes de couplage entre thermo-

2.4. MODÉLISATION DU COMBUSTIBLE UO_2 EN RÉACTEUR

mécanique et physico-chimie du combustible. Bien entendu, une telle approche n'a pas pour rôle de se substituer au calcul de structure, mais peut permettre d'en affiner les modèles et les hypothèses.

Deuxième partie

Modèle d'agrégat polycristallin pour l' UO_2

Chapitre 3

Représentation de l'agrégat

Les éléments de bibliographie présentés aux chapitres 1 et 2 ont mis en évidence la nécessité d'étudier le comportement du dioxyde d'uranium à l'échelle du polycristal. Avant d'analyser plus en détail le comportement du matériau, il est nécessaire de se donner une représentation géométrique de l'agrégat polycristallin.

Dans ce chapitre, nous décrivons les deux formalismes mis en œuvre dans le cadre de la thèse. Nous nous intéressons d'abord à une approche à champ moyen, basée sur le schéma auto-cohérent et qui ne fait pas intervenir de description spatiale de l'agrégat.

Par la suite, nous nous attachons à présenter de façon détaillée le modèle à champ complet développé au cours de cette thèse, basé sur le concept de diagramme de Voronoï. Comme nous le verrons, ce dernier nous permet de définir une géométrie réaliste du polycristal d' UO_2 en négligeant la présence de pores dans le matériau. Les étapes successives de maillage par éléments finis de la géométrie obtenue sont aussi décrites au cours de ce chapitre.

Sommaire

3.1	Un premier modèle de polycristal : l'approche à champ moyen	62
3.1.1	Formulation auto-cohérente	62
3.1.2	Modélisation de l'agrégat d' UO_2 : vers l'approche à champ complet	64
3.2	Mosaïque de Voronoï	65
3.2.1	Définition	65
3.2.2	Modélisation du polycristal	66
3.2.3	Triangulation de Delaunay	68
3.2.4	Génération et maillage de l'agrégat	68
3.3	Périodicité	73
3.3.1	Homogénéisation périodique	73
3.3.2	Génération d'une mosaïque de Voronoï périodique	73
3.4	Microstructures générées	76
3.4.1	Propriétés morphologiques du modèle polycristallin	76
3.4.2	Propriétés du maillage par éléments finis	78
3.5	Conclusion sur la représentation géométrique du polycristal	78

3.1 Un premier modèle de polycristal : l'approche à champ moyen

Pour l'essentiel ce chapitre s'attache à la description d'un Volume Elementaire Représentatif polycristallin (VER) d' UO_2 . Le domaine généré est une représentation de la microstructure hétérogène aléatoire du combustible, dont les propriétés morphologiques et thermomécaniques effectives sont constantes d'une réalisation à l'autre et représentatives du matériau à l'échelle macroscopique.

Dans notre cas, l'hétérogénéité est constituée par les distributions de tailles de grains dans le polycristal, sur lesquelles nous reviendrons à la fin de ce chapitre, ainsi que par les orientations cristallines respectives des grains. Ces orientations, comme nous le verrons au chapitre 4, caractérisent en effet le comportement thermomécanique du monocristal d' UO_2 et entraînent des hétérogénéités locales à l'échelle de l'agrégat.

Plusieurs formulations ont déjà été proposées dans la littérature pour décrire un VER polycristallin, et peuvent être réunies en deux catégories :

- les approches à champ moyen, pour lesquelles l'information sur chaque phase (ici un ensemble de grains de même orientation) est traitée uniquement en moyenne ;
- les modèles à champ complet, où chaque grain est décrit comme un volume individuel au sein duquel des phénomènes de localisation peuvent être observés.

Bien entendu, chaque approche est caractérisée par un ensemble d'hypothèses simplificatrices qui limite sa validité. Dans le cadre de notre étude, deux formulations ont été mises en œuvre et vont maintenant être décrites : une approche auto-cohérente (à champ moyen) et une approche par éléments finis (à champ complet).

3.1.1 Formulation auto-cohérente

3.1.1.1 Principe de l'approche auto-cohérente

Les schémas auto-cohérents ont largement été utilisés pour la modélisation de polycristaux (voir par exemple [Pilvin 90]). Les grains, plutôt que d'être considérés individuellement, sont dans cette approche regroupés en "phases" cristallographiques indicées g , chaque phase étant définie par une orientation cristallographique commune à tous les grains.

Du point de vue mécanique, chaque phase est traitée comme une inclusion ellipsoïdale au sens d'Eshelby dans un milieu homogène équivalent (MHE) reprenant l'ensemble des propriétés du polycristal, comme illustré à la figure 3.1.

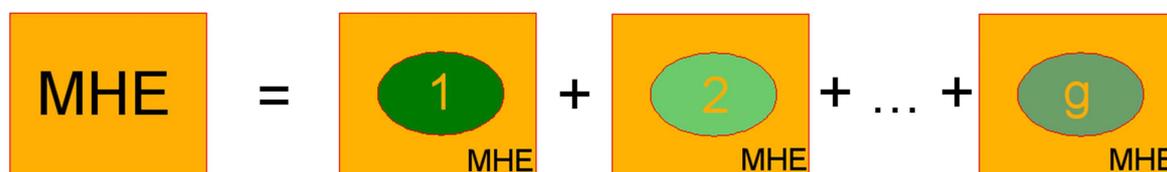


FIGURE 3.1 – Principe de l'approche auto-cohérente

Cette formulation est particulièrement adaptée à la modélisation des polycristaux pour laquelle chaque "phase" est entourée d'un grand nombre de phases cristallines et perçoit donc à son voisinage le milieu effectif du VER [Masson 98].

Pour un point $\mathbf{x} \in g$ à l'instant t , les lois de changement d'échelle associées à cette formulation peuvent se mettre sous la forme suivante :

$$\boldsymbol{\varepsilon}_g(\mathbf{x}) = \mathbf{A}_g(\mathbf{x}) : \mathbf{E} \quad (3.1) \qquad \boldsymbol{\sigma}_g(\mathbf{x}) = \mathbf{B}_g(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\Sigma} \quad (3.3)$$

$$\mathbf{E}(t) = \int_V \boldsymbol{\varepsilon}(t) dV \quad (3.2) \qquad \boldsymbol{\Sigma}(t) = \int_V \boldsymbol{\sigma}(t) dV \quad (3.4)$$

avec $(\mathbf{A}_g, \mathbf{B}_g)$ les tenseurs de localisation en déformation (respectivement en contrainte) associés à la phase g et construits à partir de la solution au problème d'inclusion ellipsoïdale d'Eshelby, $(\boldsymbol{\varepsilon}_g(\mathbf{x}), \boldsymbol{\sigma}_g(\mathbf{x}))$ la déformation (resp. la contrainte) locale en tout point x de la phase g et $(\mathbf{E}, \boldsymbol{\Sigma})$ la déformation (resp. la contrainte) effective dans le VER. L'approche auto-cohérente fait appel à l'hypothèse simplificatrice d'uniformité des champs mécaniques dans chaque "grain" :

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}, t) = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^g(t) \quad \forall \mathbf{x} \in g \quad (3.5)$$

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t) = \bar{\boldsymbol{\sigma}}^g(t) \quad \forall \mathbf{x} \in g \quad (3.6)$$

Ce type de schéma ne propose donc pas de description spatiale du polycristal¹ : par nature, le schéma auto-cohérent ne modélise les grains qu'à travers le comportement de la phase à laquelle ils appartiennent, et la localisation des contraintes se limite elle aussi à l'échelle de la phase cristallographique d'après les équations (3.5) et (3.6).

Malgré tout, cette approche permet de traiter le comportement du polycristal d'une façon moins onéreuse en termes de temps de calcul qu'une méthode à champ complet telle que les éléments finis. Pour cette raison, elle a été principalement mise en œuvre pour l'identification des lois de comportement présentées au chapitre 4 pour laquelle de nombreux calculs sont nécessaires et où les résultats pris en compte se limitent au comportement effectif du VER.

3.1.1.2 Formulation affine quasi-élastique

L'une des difficultés inhérentes à l'approche auto-cohérente est la résolution du problème d'inclusion d'Eshelby dans le cas de matériau non-linéaires. Si dans le domaine linéaire il existe des solutions analytiques connues à ce problème, la mise en œuvre de cette formulation pour des lois de comportement non-linéaires nécessite de faire appel à une stratégie de linéarisation des équations constitutives.

C'est la formulation affine développée par Masson et Zaoui [Masson 99] qui a été retenue pour la simulation du comportement du combustible et que nous allons décrire brièvement. Pour un matériau viscoélastique dont la loi de comportement s'écrit pour tout couple (X, t) sous la forme générale 3.7 :

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}(X, t) = \frac{1}{L_g^e} \dot{\boldsymbol{\sigma}}(X, t) + g(\boldsymbol{\sigma}(X, t)) \quad (3.7)$$

Cette loi de comportement est valable pour chacune des phases g du milieu. Il est nécessaire de linéariser l'équation (3.7) pour se ramener au problème d'Eshelby classique. Pour ceci, la partie inélastique du comportement $g(\boldsymbol{\sigma}(X, t))$ peut être approchée par $\frac{\partial g}{\partial \boldsymbol{\sigma}}(\bar{\boldsymbol{\sigma}}_g(t)) : \boldsymbol{\sigma}(X, t)$ calculée à partir du tenseur de contraintes moyen $\bar{\boldsymbol{\sigma}}_g$ dans la phase considérée. On obtient donc :

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}(X, t) = \frac{1}{L_g^e} \dot{\boldsymbol{\sigma}}(X, t) + \frac{\partial g}{\partial \boldsymbol{\sigma}}(\bar{\boldsymbol{\sigma}}_g(t)) : \boldsymbol{\sigma}(X, t) + \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_g^0(t) \quad (3.8)$$

1. En toute rigueur, la caractérisation de l'ellipsoïde qui caractérise une phase permet malgré tout de représenter la distribution des grains constituant cette phase dans l'agrégat

Où $\dot{\varepsilon}_g^0(t) = \overline{\varepsilon^0}(X, t)$, indépendant de la contrainte, permet de prendre en compte l'historique de chargement subi par le matériau. Il reste à intégrer l'équation (3.8) pour connaître le comportement de chaque phase sous la forme $\varepsilon(\sigma)$. Pour cela il est possible de passer dans l'espace de Laplace-Carson par la transformation du même nom :

$$f^*(p) = p \int_0^\infty f(t) e^{-pt} dt \quad (3.9)$$

avec la propriété remarquable $\dot{f}^* = p f^*$. Ce qui nous permet d'écrire la loi de comportement de la phase g :

$$\varepsilon^*(X, p) = \left[\frac{1}{L_g^e} + \frac{1}{p} \frac{\partial g}{\partial \sigma} (\bar{\sigma}_g(p)) \right] \sigma^*(p) + \varepsilon^{*0}(p) \quad (3.10)$$

L'écriture de la loi de comportement obtenue est donc linéaire en $\sigma^*(p)$. Le comportement macroscopique de l'agrégat $\mathbf{E}(\Sigma)$ est déterminé par le schéma auto-cohérent caractérisé par les tenseurs de concentrations de contraintes \mathbf{B}_g^* tels que $\bar{\sigma}^*_g = \mathbf{B}_g^* \bar{\Sigma}^*$.

Soit $\mathbf{q}_g^*(p) = \frac{1}{L_g^e} + \frac{1}{p} \frac{\partial g}{\partial \sigma} (\bar{\sigma}_g(p))$, on peut alors écrire :

$$\bar{\mathbf{E}}^*(p) = \bar{\mathbf{Q}}^*(p) : \bar{\Sigma}^*(p) + \bar{\mathbf{E}}^{*0}(p) \quad (3.11)$$

avec $\bar{\mathbf{Q}}^*(p) = \overline{\mathbf{q}_g^* \mathbf{B}_g^*}$ et de même $\bar{\mathbf{E}}^{*0}(p) = \overline{\varepsilon_g^{*0}(p) \mathbf{B}_g^*}$.

Il reste encore à repasser dans l'espace réel (x, t) en effectuant la transformée inverse de Laplace-Carson. La formulation affine quasi-élastique proposée par [Brenner 02] se base sur la définition de cette transformée, donnée à l'équation (3.9) et à laquelle est appliqué le changement de variables suivant :

$$\begin{cases} f^*(p) &= p \int_{-\infty}^\infty f\left(\frac{10^w}{p}\right) e^{-pt} g(w) dw \\ g(w) &= 10^w e^{-10^w} \log_e 10 \end{cases} \quad (3.12)$$

La fonction $g(w)$, presque nulle partout sauf au voisinage de $w = 0$, est remplacée en première approximation par une distribution de Dirac. Ceci permet d'aboutir à la l'équation (3.13) :

$$f(t) \simeq f^*(p)_{p=\frac{10^{w_0}}{t}} \quad (3.13)$$

Différentes valeurs de w_0 ont été proposées selon la forme de la fonction $f(t)$. De façon générale, il faut ici retenir que l'approximation sera d'autant plus précise que les variations de contraintes et déformations au cours du temps seront régulières. Nous reviendrons sur ce point à l'occasion des comparaisons entre approche auto-cohérente et éléments finis au paragraphe 4.2.

3.1.2 Modélisation de l'agrégat d'UO₂ : vers l'approche à champ complet

La formulation auto-cohérente décrite au cours de ce paragraphe se révèle insuffisante pour la caractérisation complète du comportement de l'agrégat d'UO₂. En particulier, le comportement des joints de grains (qui jouent pourtant un rôle crucial du point de vue mécanique et en termes de diffusion des produits de fission) est difficilement accessible par cette approche à champ-moyen, pour laquelle l'interaction entre grains voisins n'est prise en compte que d'une façon "moyenne" entre une phase cristallographique et le milieu homogène équivalent.

Pour cette raison, nous nous proposons par la suite de développer une approche à champ complet du polycristal d'UO₂, pour laquelle chaque grain dispose de sa propre définition géométrique.

L'intérêt de cette approche est qu'elle permet, au prix de temps de calculs plus importants, de rendre compte plus finement des phénomènes de localisation intragranulaire et aux joints de grains.

La suite de ce chapitre se concentre sur la description du modèle à champ complet d'agrégat polycristallin mis en place au cours de cette thèse. Deux aspects seront principalement abordés : d'une part, la définition géométrique du polycristal (basée sur le concept de mosaïque de Voronoï), et d'autre part la discrétisation de cette géométrie par éléments finis pour la réalisation de simulations thermo-mécaniques.

3.2 Mosaïque de Voronoï

La génération d'un modèle élément finis de polycristal nécessite de définir une représentation géométrique la plus réaliste possible de l'agrégat. Pour cette étape, les deux approches les plus communes sont la reconstruction géométrique basée sur l'analyse d'image [Lebensohn 08] (particulièrement adaptée pour des formulations de type FFT²) et la génération de milieux aléatoires de type mosaïque de Voronoï.

Dans le cadre de cette thèse, c'est cette deuxième option, abondamment utilisée dans le domaine de la modélisation mécanique des polycristaux (voir notamment [Barbe 01]), qui a été retenue. Comme nous le verrons au paragraphe suivant, la mosaïque de Voronoï offre une description simplifiée de la géométrie du polycristal dont les propriétés morphologiques (distributions de tailles de grains, nombre de voisins) sont en accord avec celles du matériau.

Ce paragraphe s'intéresse à décrire les principaux éléments visant à la génération d'un modèle géométrique éléments finis d'agrégat polycristallin. En premier lieu sont détaillées les propriétés du diagramme de Voronoï et de son graphe dual appelé triangulation de Delaunay. Par la suite, différentes spécifications liées à la représentation du polycristal sont présentées pour amener à la construction progressive du module. Plus particulièrement nous nous intéressons aux propriétés de périodicité du Volume Elementaire Représentatif.

3.2.1 Définition

Le diagramme de Voronoï [Aurenhammer 96] d'un ensemble de n_g points $G = \{g_i, i \in \{0, \dots, n_g\}\}$ est une décomposition de l'espace en domaines C_i associés aux points g_i par l'équation (3.14) :

$$C_i = \{ p / \|p - g_i\| < \|p - g_j\| \forall j \neq i \} \quad (3.14)$$

Chaque cellule de Voronoï est donc un polyèdre convexe défini comme l'ensemble des points de l'espace plus proches d'un point g_i donné que de tous les autres. Dans le cas bidimensionnel, les cellules sont simplement délimitées par les médiatrices des segments reliant les g_i voisins (voir figure 3.2).

A noter que cette définition peut être généralisée pour des objets plus complexes que des simples points : on parle alors de diagramme de Voronoï généralisé ou de diagramme de Johnson-Mehl. Le code de calcul NEMO [Stawiaski 05] se propose notamment de générer le diagramme de Johnson-Mehl approximant une image de coupe expérimentale en faisant appel à des notions de cartes de distances. Ce type d'objet permet une meilleure représentation de la morphologie du polycristal, notamment puisqu'il permet de tenir compte de la non-convexité éventuelle des grains.

Dans notre cas, nous nous sommes limités à l'utilisation d'une mosaïque de Voronoï classique, qui reste en première approximation une bonne représentation de l'agrégat. Quelques éléments de

2. Fast Fourier Transformed. Dans le cadre de ces méthodes, le problème physique est résolu sur une grille régulière de pixels (voxels en 3D).

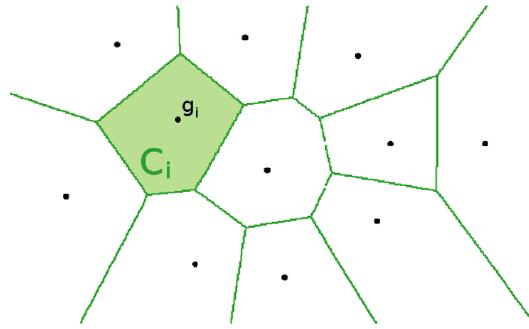


FIGURE 3.2 – Diagramme de Voronoï.

comparaison morphologique entre notre modèle de VER et le matériau réel seront présentés au paragraphe 3.4.

3.2.2 Modélisation du polycristal

Le diagramme de Voronoï est généralement considéré comme une bonne approximation de la géométrie d'un polycristal et est fréquemment cité dans la littérature (voir [Barbe 01]). L'approximation proposée repose sur les hypothèses suivantes :

- la croissance des grains autour des germes g_i débute au même instant ;
- cette croissance se fait de façon isotrope et à vitesse uniforme pour tous les grains ;
- les germes g_i ne se déplacent pas au cours de l'étape de croissance.

L'avantage d'une telle approche est qu'elle permet de générer des microstructures aléatoires dont les propriétés morphologiques (sur lesquelles nous reviendrons au paragraphe 3.4) sont proches de microstructures réelles [Fritzen 09], comme l'illustre la figure 3.3.

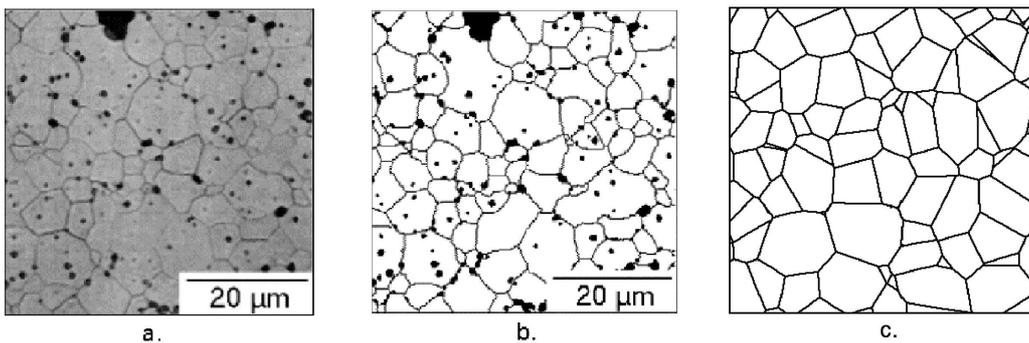


FIGURE 3.3 – Micrographie d' UO_2 (a.), image binaire correspondante (b.) [Charollais 97] et coupe 2D d'une mosaïque de Voronoï 3D à 1000 grains (c.)

Les simplifications réalisées sur la géométrie sont cohérentes avec la modélisation par éléments finis : la possibilité de définir la géométrie à partir de quelques points (sommets des arêtes du diagramme de Voronoï) en particulier, et l'hypothèse de planéité des joints de grains simplifient sensiblement l'étape de maillage.

3.2.2.1 Cas du dioxyde d'uranium

Le diagramme de Voronoï a déjà été utilisé pour modéliser la microstructure de l' UO_2 [Vincent 07]. Une étude menée par Coster et Chermant [Coster 02] a permis de démontrer que la microstructure du dioxyde d'uranium vierge pouvait être approximée de façon pertinente à l'aide d'une partition du domaine en cellules de Voronoï, en négligeant l'effet éventuel des porosités intergranulaires sur la morphologie des grains.

En particulier, la figure 3.4 met en évidence un accord satisfaisant de la distribution du nombre de faces par grain entre les données obtenues à partir d'une céramographie expérimentale telle que celle présentée à la figure 3.3 et celles issues de la microstructure modèle de Voronoï.

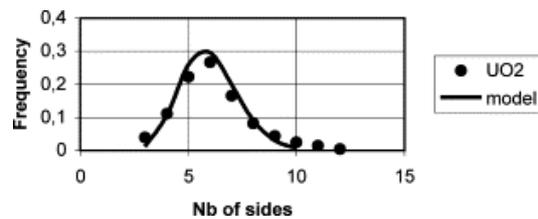
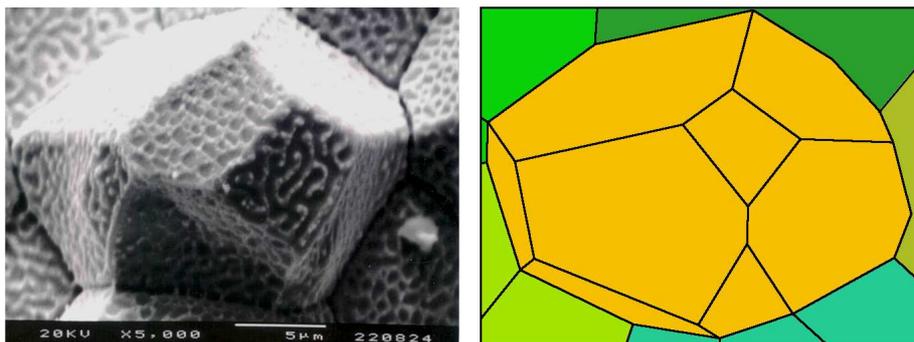


FIGURE 3.4 – Distributions expérimentale et théorique de nombre de faces dans le cas de l' UO_2 [Coster 02].

L'image 3.5 présente la comparaison entre les morphologies d'un grain d' UO_2 et d'une cellule de Voronoï 3D. Bien que ce type de comparaison qualitative ne soit pas suffisant pour assurer la représentativité morphologique du VER, nous pouvons d'ores et déjà souligner dans cet exemple la bonne correspondance entre le matériau réel et le diagramme de Voronoï, notamment du point de vue du nombre de faces du grain et de leur planéité.

Le paragraphe 3.4 sera l'occasion de revenir plus en détail sur les propriétés morphologiques respectives du combustible et de notre modèle polycristallin.



a.

b.

FIGURE 3.5 – Morphologie des grains d' UO_2 : fractographie expérimentale (a.) et mosaïque de Voronoï 3D (b.)

Dans la pratique, l'agrégat est généré par tirage aléatoire des germes avec une densité de probabilité donnée dans une "boîte" de dimensions finies. Cette première étape sera décrite de façon détaillée au paragraphe 3.2.4.1.

3.2.3 Triangulation de Delaunay

La triangulation de Delaunay $T(G)$ de l'ensemble points $G = \{g_i, i \in \{0, \dots, n_g\}\}$ est définie comme la triangulation pour laquelle tous les cercles circonscrits aux triangles de $T(G)$ sont vides, ie. qu'ils ne contiennent aucun autre sommet g_i que ceux du triangle considéré (voir figure 3.6).

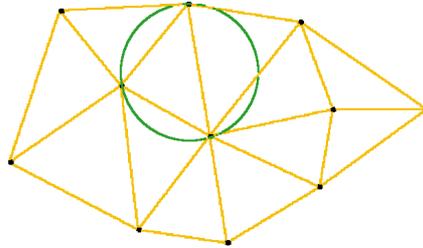


FIGURE 3.6 – Triangulation de Delaunay - définition.

La triangulation de Delaunay limite la présence de triangles allongés en maximisant le plus petit angle des angles des triangles. Pour cette raison, les algorithmes de maillage par éléments finis font souvent appel à cette triangulation qui permet d'obtenir des éléments de formes régulières.

3.2.3.1 Triangulation de Delaunay et germes du diagramme de Voronoï

La triangulation de Delaunay est le graphe dual du diagramme de Voronoï. A chaque cellule du diagramme de Voronoï est associé un sommet dans la triangulation de Delaunay (cf. figure 3.7). Ces sommets sont reliés entre eux par une arête si les cellules sont voisines. Il apparaît en particulier que les arêtes du diagramme de Voronoï sont des segments issus des médiatrices des arêtes de la triangulation de Delaunay.

Par la suite, les propriétés de cette triangulation - et plus particulièrement les liens étroits qui la relient au diagramme de Voronoï - seront mises en œuvre dans le cadre de l'établissement d'un outil de tirage aléatoire des germes du polycristal.

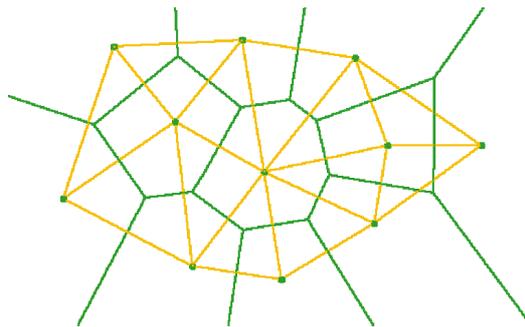


FIGURE 3.7 – Triangulation de Delaunay et diagramme de Voronoï.

3.2.4 Génération et maillage de l'agrégat

Dans le paragraphe précédent, différents éléments ont été présentés en vue de la génération du modèle de polycristal. L'objectif est à présent de réunir ces éléments pour mettre en place un outil

de génération automatisé, dont les principaux constituants vont maintenant être décrits.

Deux critères géométriques sur le tirage des germes sont présentés plus en détail dans la dernière partie de cette section (voir paragraphe 3.2.4.4), l'un destiné à assurer la possibilité de maillage par éléments finis du VER et l'autre à mieux rendre compte de la morphologie réelle de l'agrégat d' UO_2 .

3.2.4.1 Tirage des germes

La littérature (voir par exemple [Kanit 03]) préconise généralement de mettre en œuvre un processus de Poisson pour l'étape de tirage des germes. Le matériau est alors considéré comme un milieu infini Ω de densité volumique moyenne de grains ρ . La probabilité que n points appartiennent à un ensemble Z inclus dans un milieu infini est définie par :

$$P [N(Z) = n] = \frac{(\rho M(Z))^n}{n!} e^{-\rho M(Z)} \quad (3.15)$$

avec :

- ▷ $N(Z)$ le nombre de points présents dans Z .
- ▷ $M(Z)$ la mesure de Z .

Une fois les dimensions du VER fixées, le nombre de germes effectivement présent est déterminé à l'aide du tirage de Poisson. De cette manière, le tirage généré correspond rigoureusement à sous-domaine de l'ensemble Ω dont les propriétés sont supposées connues, comme l'illustre la figure 3.8. Les coordonnées des germes sont quant à elles obtenues par tirage de trois variables aléatoires uniformes indépendantes, dont les valeurs sont bornées par les dimensions du VER.

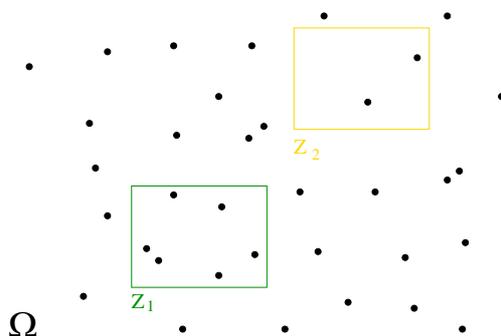


FIGURE 3.8 – Mise en œuvre schématique d'un processus de Poisson : cas de deux sous-domaines Z_1 et Z_2 d'un domaine Ω

Dans notre cas, nous avons considéré la densité de tirage comme uniforme, ce qui revient à considérer que la densité moyenne ρ est vérifiée systématiquement sur chaque sous-domaine Z_i . Cette approximation est motivée par la mise en œuvre des critères géométriques selon un principe test du critère / élimination du germe (sur lequel nous reviendrons au paragraphe 3.2.4.4), qui modifie la densité Poissonienne³.

Le tirage des germes est réalisé par un module programmé en langage C. Comme annoncé, deux critères sur la position des germes obtenus sont présentés au paragraphe 3.2.4.4 et viennent compléter le processus de tirage. Les principales étapes de l'algorithme finalement retenu sont présentées en annexe A.

3. En particulier, l'introduction de ce type de critère impose que les points ne soient plus indépendants les uns des autres, contrairement à un processus de Poisson classique.

Une fois l'étape de tirage des germes réalisée, nous pouvons passer à la génération du diagramme de Voronoï proprement dit.

3.2.4.2 Génération de la mosaïque de Voronoï

La génération proprement dite du diagramme de Voronoï associé aux germes est réalisée par le logiciel Qhull [Barber 96]. Ce programme, largement cité dans la littérature [Nygards 02], [Fritzen 09] permet entre autres de générer le diagramme de Voronoï d'un ensemble de points dans une dimension quelconque.

Le rôle du logiciel est de créer le diagramme de Voronoï associé aux points générés lors de l'étape de tirage. Qhull offre un certain nombre de données de sortie, parmi lesquelles :

- les positions des sommets des arêtes de la mosaïque ;
- les relations de correspondance cellule de Voronoï / sommets ;
- les relations de voisinage entre sommets.

Ces données sont stockées dans un fichier de sortie et permettront de reconstruire le maillage par éléments finis d'agrégat polycristallin dans CAST3M.

3.2.4.3 Maillage

L'étape de maillage est réalisée avec le code de calcul éléments finis CAST3M. A ce stade, deux possibilités sont offertes : opter pour un maillage réglé, pour lequel les éléments sont disposés selon une grille régulière, ou au contraire choisir un maillage libre dont les éléments respectent les joints de grains, comme illustré à la figure 3.9.

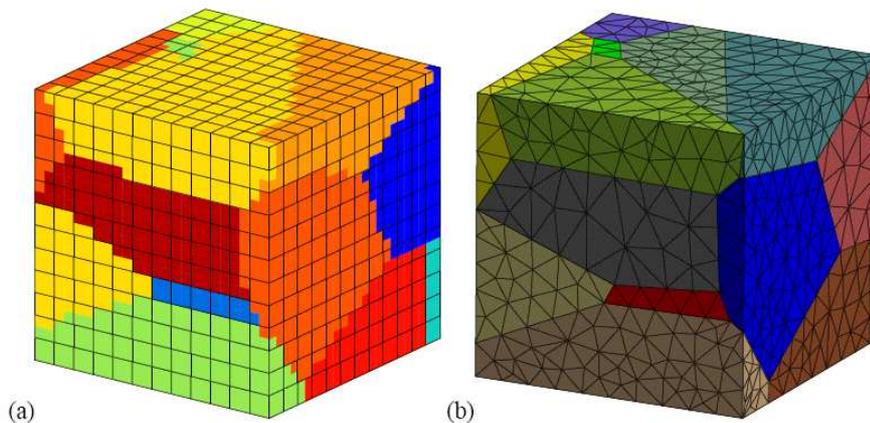


FIGURE 3.9 – Maillage réglé (a.) et maillage libre (b.) [Kanit 03].

Cette deuxième méthode a l'avantage de respecter la géométrie des cellules de Voronoï et de modéliser les joints de grains sous la forme de plans, contrairement au maillage réglé pour lequel les joints de grains sont des surfaces crénelées. Les données fournies en sortie de Qhull étant par ailleurs parfaitement adaptées à l'utilisation d'un maillage libre, c'est cette option qui a finalement été retenue ici.

La procédure se divise en deux parties distinctes : tout d'abord la reconstruction du diagramme de Voronoï à partir des données fournies par Qhull, puis le maillage proprement dit des grains. Les

différentes étapes du maillage obéissent à un principe de reconstruction progressive de la géométrie :

- lecture des **points** sommets des arêtes de la mosaïque (fig. 3.10 a.) ;
- reconstruction des **arêtes** de chaque cellule de Voronoï à partir des tables de correspondances fournies par Qhull (fig. 3.10 b.) ;
- maillage des **facettes** de chaque grain avec des éléments triangles (fig. 3.10 c.) ;
- maillage **volumique** des grains avec des éléments tétraédriques (fig. 3.10 d.).

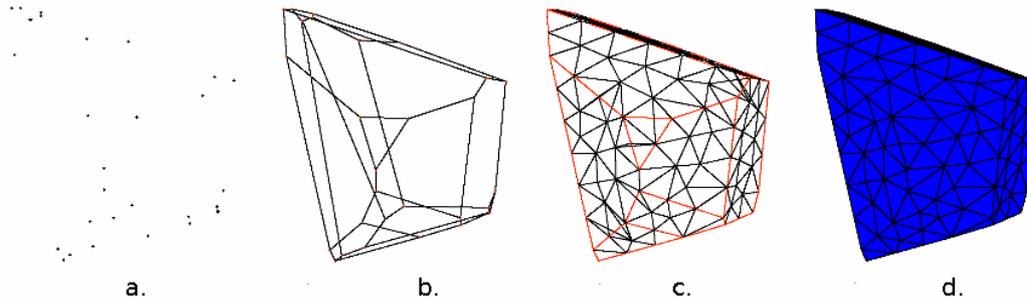


FIGURE 3.10 – Différentes étapes de la procédure de maillage

3.2.4.4 Améliorations du modèle

Il est possible d'améliorer le module présenté dans les paragraphes précédents en introduisant un certain nombre de critères géométriques lors de la phase de tirage de germes de grains. L'objectif est double : se rapprocher de la réalité physique du polycristal et simplifier la mise en œuvre du modèle élément finis.

3.2.4.4.1 Noyau de répulsion Le noyau de répulsion est une distance minimum imposée entre les germes lors du tirage, qui permet de contrôler la distribution de tailles de grains dans le polycristal. Le critère peut s'écrire sous la forme 3.16 :

$$\|g_j - g_i\| > r_{min} \quad (3.16)$$

Du point de vue du diagramme de Voronoï, l'introduction de ce noyau de répulsion revient à prendre en compte une taille initiale non nulle uniforme des germes. En jouant sur ce critère il est possible de contrôler les distributions de tailles de grains (comme illustré à la figure 3.11) pour se rapprocher de la réalité expérimentale.

3.2.4.4.2 Critère d'arête minimum Les diagrammes de Voronoï générés par Qhull sont dans le cas général des objets complexes du point de vue de la discrétisation. En particulier la disparité de tailles des arêtes d'une face de grain peut poser d'importantes difficultés en termes de raffinement de maillage (cf. figure 3.12).

[De Bonnières 09] propose un critère géométrique sur les positions des germes pour contourner cette difficulté. Ce critère repose sur la corrélation entre la taille des arêtes du diagramme de Voronoï et la position des germes respectivement aux cercles circonscrits aux triangles de Delaunay voisins.

Pour un ensemble de points G germes des grains, nous définissons S l'ensemble des sommets des arêtes du diagramme de Voronoï associé à G et r_j le rayon du cercle circonscrit au triangle de Delaunay associé au sommet s_j . Le critère imposé peut s'écrire sous la forme 3.17 :

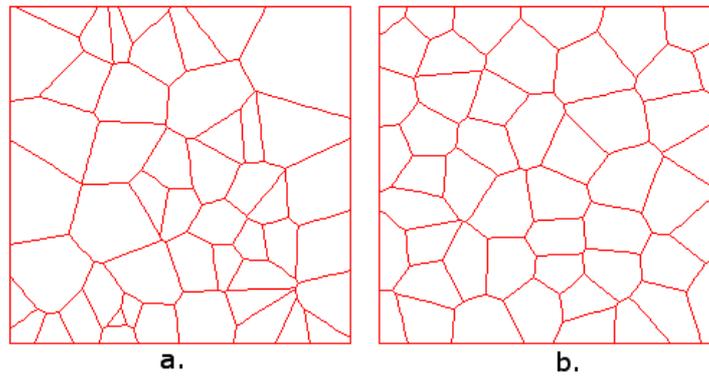


FIGURE 3.11 – Diagramme de Voronoï sans (a.) ou avec (b.) noyau de répulsion

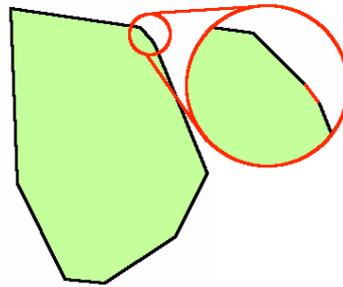


FIGURE 3.12 – Mise en évidence des difficultés de maillage

$$\| \|g_i - s_j\| - r_j \| \geq \varepsilon, \forall g_i \in G, s_j \in S \quad (3.17)$$

Ce critère est illustré visuellement dans le cas 2D à la figure 3.13. Aux trois germes initiaux (fig. 3.13.a) est ajouté un nouveau germe g_i . Si ce germe est trop proche du cercle circonscrit au triangle de Delaunay formé par les trois germes initiaux alors une “petite” arête se forme (fig. 3.13.b). Dans le cas où la distance entre le nouveau germe et le cercle est grande (fig. 3.13.c) la géométrie générée est plus régulière.

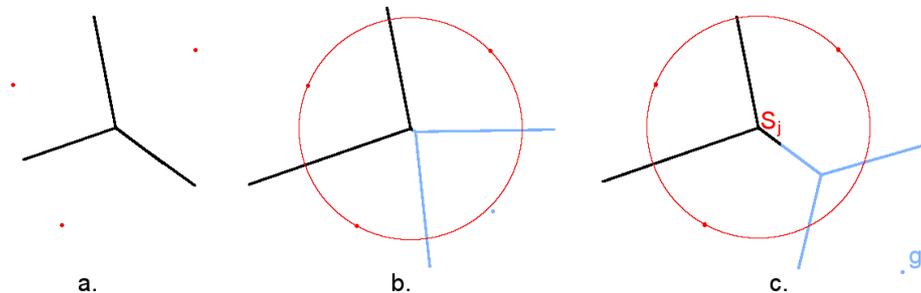


FIGURE 3.13 – Illustration du critère de taille d’arête minimum

Dans la pratique il n’est pas nécessaire de vérifier cette relation pour tous les couples $\{g_i, s_j\}$. La zone d’influence de chaque germe - pour laquelle le germe considéré va impacter le graphe de

Delaunay - est limitée aux voisins de second rang (en jaune sur la figure 3.14). Les triangles de la zone centrale (en vert) au voisinage direct du nouveau germe seront “détruits” par la modification de la triangulation de Delaunay tenant compte de ce germe et n’ont aucune influence sur la géométrie finale du diagramme.

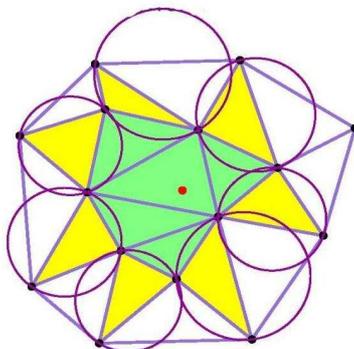


FIGURE 3.14 – Zone d’influence d’un germe

La mise en place de ce second critère géométrique a abouti à l’implémentation d’un algorithme de tirage des germes schématisé en annexe A. Du point de vue des maillages obtenus, ce critère a permis d’obtenir un ratio d’éléments finis par grains relativement faible pour des tailles d’agrégat allant jusqu’à 400 grains.

3.3 Périodicité

3.3.1 Homogénéisation périodique

Une des finalités des calculs effectués sur le VER est de déterminer le comportement macroscopique effectif du matériau. Dans ce cadre, les milieux périodiques offrent des propriétés intéressantes vis-à-vis des techniques d’homogénéisation permettant le changement d’échelles entre le VER et la structure. Travailler sur une géométrie périodique permet de mettre de côté les effets de bords indésirables générés par le VER qui parasitent la réponse obtenue. [Kanit 03] a montré dans le cas d’un polycristal élastique biphasé que les conditions de périodicité permettaient d’atteindre la convergence du comportement effectif pour des tailles de domaines plus réduites que des conditions de contraintes ou déformations homogènes.

3.3.2 Génération d’une mosaïque de Voronoï périodique

La génération d’un modèle éléments finis de polycristal périodique nécessite a minima de pouvoir générer une mosaïque de Voronoï périodique. Pour ceci, il suffit de translater les germes des cellules dans toutes les directions adjacentes à la boîte initiale dans laquelle sont tirés les germes comme illustré figure 3.15. Huit translations sont nécessaires dans le cas bidimensionnel, et 26 dans le cas tridimensionnel.

Du diagramme de Voronoï généré à partir de l’ensemble de germes périodique obtenu, il est possible d’extraire un motif satisfaisant les conditions de périodicité.

La géométrie retenue peut être la partie centrale du découpage de la mosaïque de Voronoï par une grille régulière en sous-domaines dont les dimensions horizontales et verticales sont les normes des vecteurs de périodicité utilisés pour les translations du tirage de germes initial. La géométrie

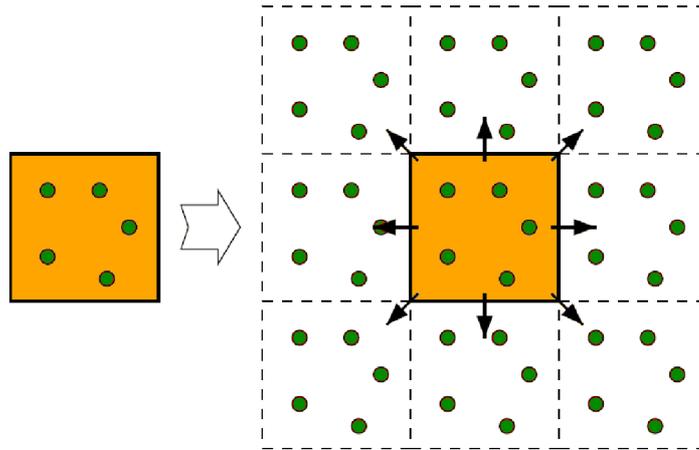


FIGURE 3.15 – Construction d'un ensemble de germes périodique [Fritzen 09]

obtenue, dite “régulière”, est caractérisée par ses frontières rectilignes qui “tronquent” les grains situés en périphérie (voir figure 3.16 - a.).

Mais il est aussi possible de retenir comme période l'ensemble des cellules de Voronoï associées aux germes du tirage initial. Cette géométrie est dite “irrégulière” : ses bords ne sont plus rectilignes mais respectent les frontières des grains. (voir figure 3.16 - b.).

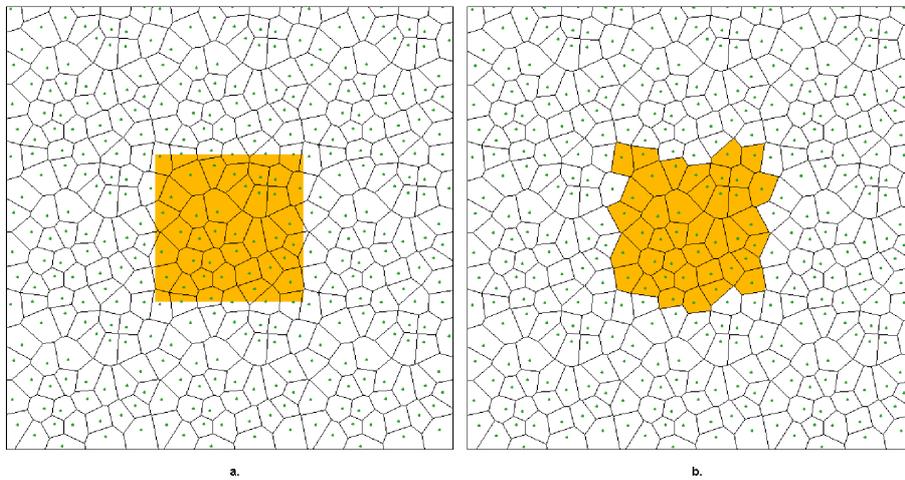


FIGURE 3.16 – Extraction d'un motif périodique régulier (a) ou irrégulier (b.)

Ces deux géométries sont équivalentes et devraient permettre d'aboutir aux mêmes résultats dans le cadre de simulations mécaniques. Le choix de la géométrie retenue doit se faire en tenant compte des spécificités offertes par ces deux approches.

S'il semble naturel de retenir le VER à bords rectilignes, il convient de souligner ici les difficultés induites par cette géométrie dans le cadre d'un calcul éléments finis. En particulier, la manière dont les grains sont “coupés” aux frontières du volume (voir figure 3.16) peut générer d'importantes difficultés de maillage, puisque la taille des objets à traiter perd de fait son uniformité : les grains

aux limites du VER se trouvent “dispersés” en fragments qui constituent des objets de taille aléatoire qu’il convient de mailler avec précaution. Outre le fait de perdre l’unicité grain / objet de maillage volumique, cette difficulté, toute relative dans le cas bidimensionnel, devient ardue en 3D.

A l’inverse, une géométrie “irrégulière” permet de traiter des objets (les grains) de taille homogène selon le tirage initial. Bien entendu, la difficulté inhérente à cette optique est le choix des conditions aux limites à considérer pour le calcul proprement dit.

Une étude a permis de démontrer la validité de l’écriture des conditions de périodicité sur le VER irrégulier [Pacull 09]. Une partie des calculs est présentée en annexe C. A partir des conclusions de cette étude, la géométrie irrégulière a été retenue pour trois raisons principales :

- les données fournies par Qhull (sommets des arêtes des grains) sont cohérentes avec cette géométrie ;
- la bijection entre objets de maillage volumique et grains ;
- la non-nécessité de surmailler certaines zones du VER selon des motivations exclusivement géométriques (par opposition avec des arguments physiques liés à des phénomènes de localisation).

3.3.2.1 Périodicité du maillage

Les relations de périodicité sur le contour de l’agrégat doivent être écrites pour chaque couple de noeuds en vis-à-vis. Il est donc nécessaire de respecter les propriétés de périodicité du point de vue du maillage : il convient de s’assurer que les faces de grains correspondantes par périodicité seront maillées de la même manière, comme illustré figure 3.17.

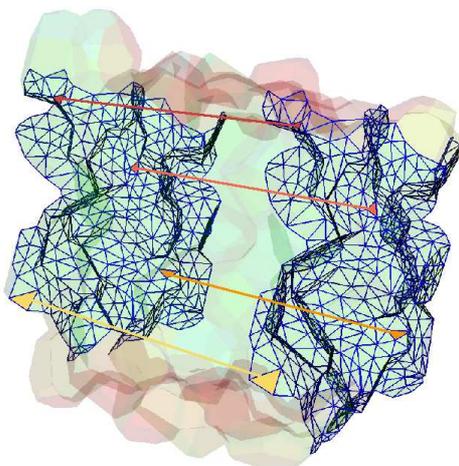


FIGURE 3.17 – Mise en évidence de la périodicité du maillage de l’agrégat

Pour y parvenir dans CAST3M, il suffit de s’assurer que les segments constituant le contour de deux faces en vis-à-vis sont numérotés de la même manière pour obtenir le même maillage surfacique. Dans le cas contraire, les maillages obtenus ne seront pas identiques et la condition de périodicité ne sera pas respectée, comme le montre la figure 3.18.

Cette difficulté est traitée lors de l’étape de reconstruction des arêtes des cellules de Voronoï (voir fig. 3.10 b.) : les segments générés sont regroupés par joints de grains (ie. l’ensemble des segments formant un contour plan à la surface d’une cellule) et chaque contour ainsi repéré est comparé à ceux déjà en mémoire. Lorsque deux contours se correspondent par périodicité, l’un des

deux est supprimé et remplacé par son vis-à-vis (translaté du vecteur de périodicité correspondant) de façon à avoir le même repérage des segments et ultérieurement le même maillage surfacique.

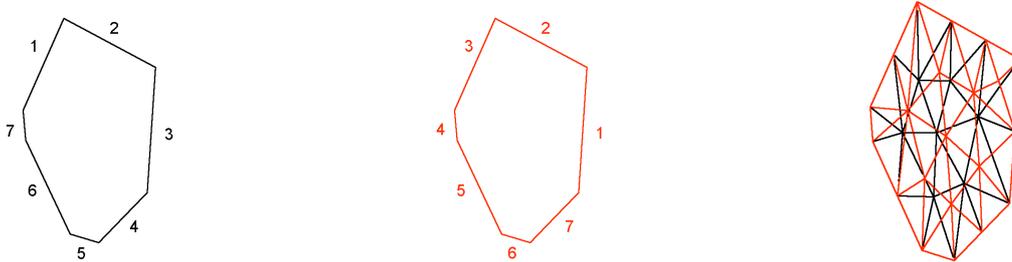


FIGURE 3.18 – Numérotation du contour et maillage surfacique

3.4 Microstructures générées

Il convient maintenant d'analyser les propriétés des polycristaux générés par le module décrit précédemment. Deux aspects en particulier sont significatifs pour le modélisateur : les propriétés morphologiques du VER obtenu (par comparaison avec celles d'un échantillon expérimental) et les caractéristiques de la discrétisation par éléments finis, dont dépendront en partie les performances numériques du modèle. A ce stade, il est nécessaire de s'assurer de la bonne représentativité morphologique du VER par rapport au matériau réel.

3.4.1 Propriétés morphologiques du modèle polycristallin

3.4.1.1 Nombre de grains voisins

L'étude des propriétés morphologiques des agrégats générés permet de valider la bonne représentation du matériau réel. En reprenant les résultats présentés par [Coster 02], il est possible de mettre en évidence la bonne corrélation entre les données expérimentales et les microstructures générées dans le cadre de notre étude.

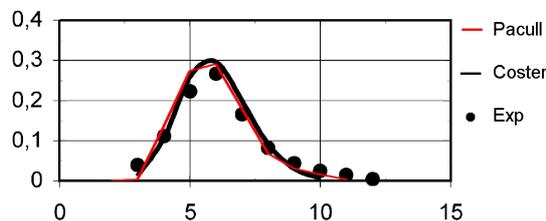


FIGURE 3.19 – Distributions expérimentale et théorique de nombre de faces dans le cas de l' UO_2 -résultats obtenus [Coster 02].

En particulier, on retrouve un très bon accord en termes de distribution du nombre de voisins entre la bibliographie et les résultats obtenus dans le cas d'une microstructure 2D (voir figure 3.19). Il s'agit d'un premier argument qui accrédite la validité du modèle d'agrégat polycristallin présenté dans cette thèse.

3.4.1.2 Distribution de tailles de grains

Un autre élément pertinent d'étude concerne la répartition des tailles de grains dans l'agrégat. Cette analyse a été faite en utilisant NEMO, le code de traitement d'image développé au CEA [Stawiaski 05]. La taille de grain est ici définie comme le diamètre du disque de surface équivalente au grain considéré.

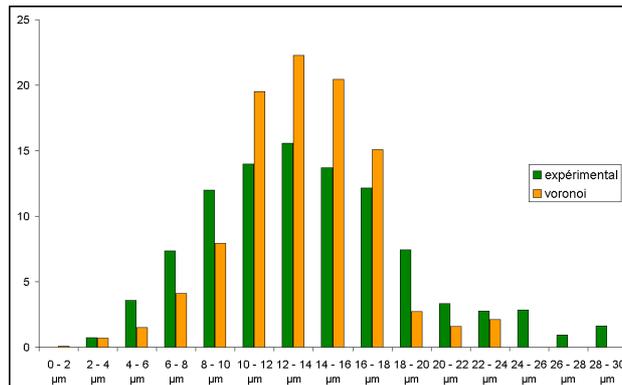


FIGURE 3.20 – Distributions expérimentale et théorique des tailles de grains : cas d'un VER à 1000 grains, avec un noyau de répulsion $r_{min} = 3,2 \mu\text{m}$

L'analyse morphologique d'un plan de coupe d'une mosaïque de Voronoï 3D généré avec un noyau de répulsion de $3,2 \mu\text{m}$ montre un accord qualitatif satisfaisant avec les mesures expérimentales, comme illustré aux figures 3.20 et 3.21.

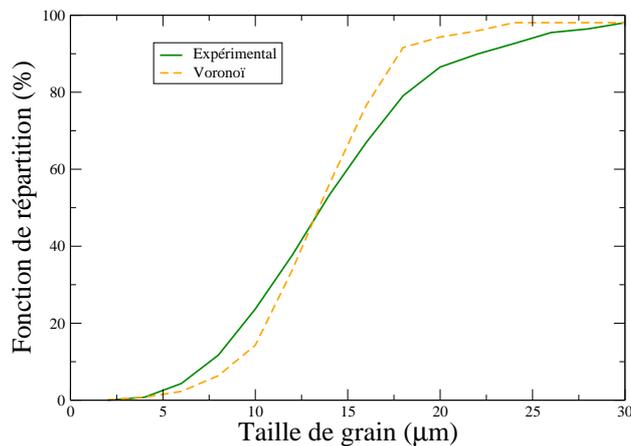


FIGURE 3.21 – Fonction de répartition des tailles de grains : modèle et expérience

Il apparaît toutefois dans cet exemple que pour la distribution de tailles obtenues à partir du modèle l'étalement est plus faible que celui obtenu expérimentalement. Une étude plus approfondie de l'impact du noyau de répulsion sur les distributions de tailles de grains pourrait permettre d'améliorer la représentativité morphologique du VER. Dans le cadre de la thèse, nous nous sommes toutefois limités à ces premiers éléments de validation.

3.4.2 Propriétés du maillage par éléments finis

La qualité de la discrétisation de l'agrégat repose sur un compromis entre limitation du temps de calcul et précision des résultats obtenus. La figure 3.22 résume les propriétés des maillages générés en portant l'évolution du nombre d'éléments total de l'agrégat en fonction du nombre de grains.

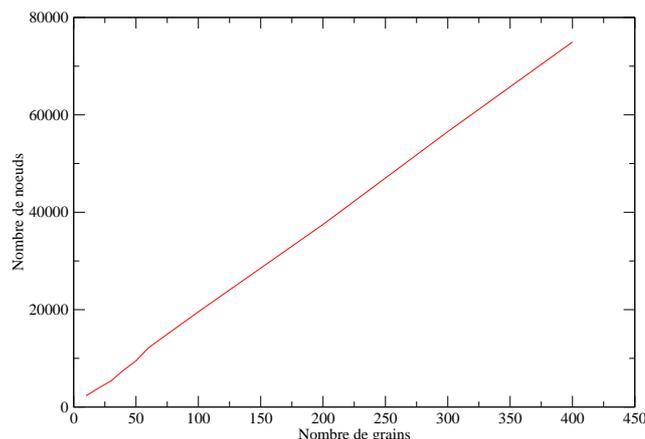


FIGURE 3.22 – Nombre d'éléments du maillage en fonction de la taille de l'agrégat

Il apparaît immédiatement que le nombre d'éléments moyen par grain (195 ± 15) reste pratiquement constant pour les différentes tailles d'agrégats considérés. Le nombre relativement réduit de points d'intégration (74961 pour des éléments linéaires dans le cas de l'agrégat à 400 grains) permet d'envisager des temps de calculs raisonnables.

A titre de comparaison, [Barbe 01] propose une moyenne de 661 points de Gauss par grain pour l'intégration d'une loi de plasticité cristalline similaire à celle qui sera présentée au chapitre 4.2. Cette valeur est bien supérieure à celles présentées ici ($\simeq 200$) et peut être approchée en raffinant le maillage ou en mettant en œuvre des éléments quadratiques à 5 points d'intégration.

Ces questions seront débattues dans les chapitres suivants pour les différents aspects de la modélisation mécanique de l'agrégat. En la matière, il est intéressant de souligner l'importante marge opérationnelle offerte par le module de maillage présenté dans ce chapitre qui permet de travailler avec des raffinements variables en fonction de la précision attendue du résultat.

3.5 Conclusion sur la représentation géométrique du polycristal

Nous avons présenté au cours de ce chapitre deux formalismes pour décrire l'agrégat d' UO_2 . La formulation auto-cohérente, la moins onéreuse en coût de temps de calculs, sera principalement utilisée lors de l'identification numérique des paramètres du modèle de fluage intragranulaire décrit au chapitre 4.

Nous nous sommes plus longuement intéressés au modèle éléments finis développé pour la thèse. Le diagramme de Voronoï, fréquemment cité dans la littérature pour la modélisation des polycristaux offre un compromis satisfaisant entre simplicité de la géométrie et fidélité à la morphologie d'une microstructure réelle. La condition de périodicité a été abordée. La géométrie "irrégulière",

dont les frontières respectent les joints de grains, est plus favorable à la mise en œuvre de la discrétisation par éléments finis et pour cette raison a été retenue.

L'ensemble de ce travail a permis d'aboutir à un outil automatisé de génération de modèle éléments finis de polycristal 3D périodique basé sur la mosaïque de Voronoï. Deux critères géométriques sur le tirage des germes ont été mis en œuvre à cette occasion :

- un noyau de répulsion, destiné à contrôler les distributions de tailles de grains de façon à se rapprocher du matériau réel ;
- un critère d'arête minimum, développé pour faciliter l'opération de maillage de l'agrégat.

Quelques éléments de comparaison morphologique entre notre modèle d'agrégat et le matériau réel ont été fournis au paragraphe 3.4. Bien que les résultats montrent un accord qualitatif satisfaisant, ce modèle polycristallin pourrait faire l'objet d'améliorations qui dépassent largement le cadre de cette thèse. Le paramétrage du noyau de répulsion pourrait notamment nous permettre de mieux représenter les distributions de tailles de grains expérimentales. Par ailleurs, rappelons encore une fois que les pores du matériau ont été négligées en première approximation.

Il nous reste maintenant à décrire le comportement thermo-mécanique du combustible à l'échelle de l'agrégat. Ce travail, qui fait l'objet du chapitre suivant, consiste à transposer les mécanismes de déformation de l' UO_2 identifiés au chapitre 2 en proposant un formalisme pour les décrire en tenant compte des propriétés microstructurales du matériau.

Chapitre 4

Mécanismes de déformation du combustible

Après avoir décrit la représentation géométrique de l'agrégat polycristallin, nous devons modéliser le comportement thermomécanique des grains. Les principaux impératifs de ce modèle sont les suivants :

- décrire le comportement élasto-viscoplastique du combustible sur l'ensemble de la gamme de sollicitations thermomécaniques rencontrées pendant une irradiation en rampe de puissance ;
- valider le comportement effectif du polycristal en prenant pour référence les modèles macroscopiques développés pour le dioxyde d'uranium dans le cadre de la plateforme PLEIADES, en particulier la loi Gatt - Monerie (présentée à la section 2.3) ;
- tenir compte des éléments connus de la caractérisation micromécanique du matériau de façon à représenter le plus fidèlement possible le comportement intragranulaire.

Sommaire

4.1	Elasticité de l'agrégat d'UO₂	82
4.1.1	Elasticité du cristal d'UO ₂	82
4.1.2	Homogénéisation périodique	83
4.1.3	Analyse de l'anisotropie du polycristal d'UO ₂	85
4.1.4	Bilan des résultats obtenus dans le domaine élastique	88
4.2	Première approche pour la plasticité cristalline	88
4.2.1	Mouvements de dislocations dans l'UO ₂	89
4.2.2	Pic de compression et avalanche de dislocations	91
4.2.3	Identification des paramètres du modèle PC _U	95
4.2.4	Analyse des résultats obtenus avec le modèle PC _U	98
4.3	Modélisation du fluage intragranulaire	101
4.3.1	Prise en compte du fluage-diffusion	101
4.3.2	Modification du fluage-dislocations	102
4.3.3	Identification des paramètres du modèle ld ₂	103
4.3.4	Modèles de fluage intragranulaire : bilan	105
4.4	Glissement et décohésion intergranulaire	107
4.4.1	Les joints de grains dans l'UO ₂	107
4.4.2	Modèles de zones cohésives	109
4.4.3	Implémentation dans le modèle d'agrégat	111
4.5	Conclusions sur les mécanismes de déformation du polycristal	114

4.1 Elasticité de l'agrégat d'UO₂

Cette partie propose une première estimation de la représentativité du VER polycristallin à travers une série de calculs d'homogénéisation élastique. Ces premiers calculs sont aussi l'occasion de valider les outils développés dans le chapitre précédent. En particulier, sont détaillées les conditions de périodicité dans le cas d'un VER de géométrie "irrégulière", dont les frontières respectent les joints de grains.

Un modèle élastique anisotrope est associé à chaque grain de l'agrégat dont les propriétés de symétrie correspondent à celles du cristal d'UO₂. Deux méthodes sont envisagées pour la génération des orientations cristallines : un tirage aléatoire uniforme et une méthode visant à optimiser l'isotropie effective du polycristal. Enfin, une estimation de l'écart à l'isotropie du comportement macroscopique de VER basée sur des méthodes de projection est proposée et permet de quantifier la représentativité du VER en fonction du nombre de grains qui le constituent.

4.1.1 Elasticité du cristal d'UO₂

4.1.1.1 Cristallographie

Le dioxyde d'uranium cristallise dans la structure fluorine CaF_2 : le cristal d'UO₂ est constitué d'un réseau de cations U^{4+} de géométrie cubique à face centrées dont les sites tétraédriques sont occupés par un sous réseau cubique d'anions O^{2-} (voir figure 4.1).

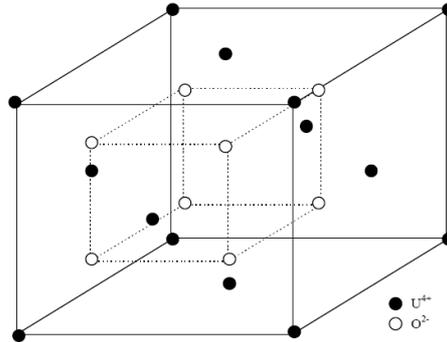


FIGURE 4.1 – Structure du dioxyde d'uranium

Le comportement élastique du cristal UO₂ respecte les propriétés de symétrie issues de la cristallographie : le tenseur d'élasticité vérifie donc la symétrie cubique. Avec les notations de Voigt on peut exprimer ce tenseur sous la forme :

$$\mathbf{C}_{\text{UO}_2} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{pmatrix}$$

4.1.1.2 Mesures expérimentales

Des mesures expérimentales réalisées sur monocristaux [Wolfe 67] ont permis de déterminer les valeurs des paramètres C_{11} , C_{12} et C_{44} . Les valeurs numériques sont données dans le tableau 4.1

et permettent de réaliser une première estimation de l'anisotropie du matériau monocristallin à travers le facteur d'anisotropie A ($A = \frac{2C_{44}}{C_{11} - C_{12}}$, avec $A = 1$ pour un cristal isotrope.).

C_{11} (MPa)	3.96e11
C_{12} (MPa)	1.21e11
C_{44} (MPa)	0.64e11
A	0.47

TABLE 4.1 – Constantes élastiques du monocristal de dioxyde d'uranium : mesures expérimentales

4.1.2 Homogénéisation périodique

Les calculs menés dans ce paragraphe visent à estimer le comportement macroscopique du polycristal en associant à chaque grain de l'agrégat le modèle de comportement élastique anisotrope présenté précédemment.

Le tenseur d'élasticité effectif du VER est déterminé par plusieurs simulations de traction à déformation imposée. Les résultats obtenus permettent de faire une première analyse de la représentativité du VER retenu. En particulier, l'objectif est de retrouver l'isotropie macroscopique du matériau observée expérimentalement dans le comportement équivalent établi par les simulations sur le VER. Nous mettons en œuvre la méthode basée sur les travaux de [Gazis 63] en vue de quantifier le caractère isotrope d'un tenseur et dont les principaux éléments seront rappelés plus loin.

4.1.2.1 Caractérisation des essais numériques

Les différentes simulations sont menées sur des VER générés via la procédure décrite au chapitre précédent. Etant donnée l'hypothèse de périodicité du polycristal, le déplacement peut se mettre pour chaque noeud $\mathbf{x}(x_1, x_2, x_3)$ sous la forme : $\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{E}.\mathbf{x} + \mathbf{u}^\#(\mathbf{x})$ où \mathbf{E} est la déformation moyenne du VER et $\mathbf{u}^\#$ le déplacement périodique. Si \mathbf{x}^m et \mathbf{x}^n sont deux noeuds en vis à vis sur les frontières du maillage, les conditions de périodicité pour ces deux noeuds peuvent alors s'écrire (voir [Bourgeois 06]) :

$$\mathbf{E}.\mathbf{x}^m - \mathbf{u}(\mathbf{x}^m) = \mathbf{E}.\mathbf{x}^n - \mathbf{u}(\mathbf{x}^n) \quad (4.1)$$

ce qui nous permet de mettre le déplacement macroscopique $\Delta\mathbf{U}$ associé à la déformation moyenne \mathbf{E} imposée sous la forme :

$$\Delta\mathbf{U} = \mathbf{u}(\mathbf{x}^m) - \mathbf{u}(\mathbf{x}^n) = \mathbf{E}.\mathbf{(\mathbf{x}^m - \mathbf{x}^n)} \quad (4.2)$$

Cette relation exprime la condition de périodicité comme équation linéaire entre degrés de liberté, que les codes de calculs peuvent traiter classiquement. Plusieurs calculs sont effectués en imposant à chaque fois la déformation moyenne unitaire du VER (voir tableau 4.2).

Il convient de bien préciser les vecteurs de périodicité pour le VER "irrégulier" retenu. La méthode de construction du VER impose de tenir compte de directions de périodicité supplémentaires par rapport au cas usuel dit "régulier" (une géométrie cubique dans le cas 3D) : jusqu'à 13 vecteurs seront ainsi nécessaires, dont la construction est détaillée en annexe C.2.

$$\mathbf{E}^1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \mathbf{E}^2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \mathbf{E}^3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \mathbf{E}^4 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0.5 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \mathbf{E}^5 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0.5 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \mathbf{E}^6 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0.5 \end{pmatrix}$$

TABLE 4.2 – Tenseur de déformations macroscopiques des différents essais

En appliquant les déformations E^i (décrites au tableau 4.2) aux frontières du polycristal, le comportement homogénéisé de l'agrégat peut se déduire immédiatement de la contrainte macroscopique $\Sigma = \int_V \sigma dV$ à partir de l'équation 4.3 :

$$\Sigma_j = C_{ij} E_i \quad (4.3)$$

donnée avec les notations de Einstein. En particulier avec les sollicitations unitaires imposées précédemment on retrouve pour la sollicitation E^i :

$$C_{ij} = \Sigma_j \quad (4.4)$$

4.1.2.2 Estimation de l'anisotropie effective

La méthode d'estimation de l'anisotropie d'un tenseur consiste à projeter ledit tenseur sur une base de tenseurs isotropes (\mathbf{B}_1), (\mathbf{B}_2) issue de la décomposition classique partie sphérique / partie déviatorique :

$$\Pi \mathbf{C} = K \mathbf{B}_1 + G \mathbf{B}_2 \quad (4.5)$$

où K et G sont respectivement les modules de compressibilité et de cisaillement, et \mathbf{B}_1 et \mathbf{B}_2 sont définis comme suit :

$$\mathbf{B}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \mathbf{B}_2 = \begin{pmatrix} \frac{4}{3} & -\frac{2}{3} & -\frac{2}{3} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{2}{3} & \frac{4}{3} & -\frac{2}{3} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{2}{3} & -\frac{2}{3} & \frac{4}{3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Considérons la décomposition d'un tenseur \mathbf{C} quelconque sous la forme de 4 sous-matrices de type :

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} C_1 & C_2 \\ C_2^T & C_3 \end{pmatrix}$$

nous pouvons alors définir une norme de \mathbf{C} comme suit :

$$\|\mathbf{C}\| = \text{Tr} (C_1 \cdot C_1 + 2C_2 \cdot C_2^T + 2C_2^T \cdot C_2 + 4C_3 \cdot C_3) \quad (4.6)$$

La distance au sens de cette norme entre le tenseur \mathbf{C} et son projeté $\Pi \mathbf{C}$ permet d'évaluer son caractère anisotrope. Nous définissons donc un critère d'isotropie de \mathbf{C} :

$$R(\mathbf{C}) = \frac{\|\Pi \mathbf{C} - \mathbf{C}\|}{\|\mathbf{C}\|} \quad (4.7)$$

Plus ce rapport est proche de 0 et plus le VER est proche de l'isotropie macroscopique observée pour les pastilles d'UO₂. En revanche, l'approximation isotrope est très mauvaise dès lors que le rapport $R(\mathbf{C})$ tend vers 1.

La méthode de projection d'un tenseur quelconque sur une base de tenseurs isotropes a été développée par [Gazis 63]. Elle a déjà été utilisée pour estimer l'écart à l'isotropie d'un modèle mécanique par [Castelier 07] dans le cadre de l'homogénéisation des propriétés thermoélastiques des plaques CERMET.

4.1.3 Analyse de l'anisotropie du polycristal d'UO₂

La première étape consiste à valider les développements effectués en comparant les résultats obtenus par la simulation avec un seul jeu d'orientations cristallines pour tous les grains avec une expression analytique formulée pour le monocristal.

Une deuxième série de calculs est effectuée en retenant pour les orientations cristallines une distribution aléatoire uniforme (voir annexe B pour plus de détails). Le calcul de l'erreur $R(\mathbf{C})$ permet d'estimer la représentativité du modèle d'agrégat dans le domaine élastique. Quelques aspects de localisation du comportement sont présentés, principalement en termes de concentration de contrainte.

Enfin, le dernier paragraphe présente les résultats lorsque les orientations cristallines sont choisies équiréparties afin d'optimiser la convergence du modèle vers le comportement isotrope équivalent.

4.1.3.1 Cas du monocristal

Dans le cas d'un tenseur de symétrie cubique il est possible de définir l'estimateur d'écart à l'isotropie à l'aide de formules analytiques [Castelier 07]. Soient K , G_ν et G_τ respectivement le module de compressibilité et les deux modules de cisaillement du cristal cubique définis par rapport aux composantes du tenseur d'élasticité par le jeu d'équations 4.8, 4.9 et 4.10.

$$K = \frac{(C_{11} + 2C_{12})}{3} \quad (4.8)$$

$$G_\nu = \frac{(C_{11} - C_{12})}{2} \quad (4.9)$$

$$G_\tau = C_{44} \quad (4.10)$$

L'erreur $R(\mathbf{C})$ se met sous la forme :

$$R(\mathbf{C}) = \sqrt{\frac{24}{5} \frac{(G_\nu - G_\tau)^2}{(9K^2 + 8G_\nu^2 + 12G_\tau^2)}} \quad (4.11)$$

Dans le cas de l'UO₂, et avec les valeurs expérimentales données au paragraphe 4.1.1.2, l'écart à l'isotropie $R(\mathbf{C})$ pour le monocristal a pour valeur 20,7%. Cette valeur référence a été utilisée pour valider avec succès la mise en œuvre du calcul éléments finis avant de traiter le cas du polycristal proprement dit. Cette étape de validation a été réalisée pour différents maillages en choisissant un unique jeu d'angles d'Euler pour l'ensemble des grains de l'agrégat.

4.1.3.2 Orientations réparties aléatoirement

Les premiers calculs sur polycristaux ont été réalisés en générant des orientations cristallines aléatoires distribuées uniformément comme décrit en annexe B. Pour chaque taille d'agrégat (au

sens du nombre de grains présents) le calcul de $R(\mathbf{C})$ est effectué pour plusieurs tirages d'orientations jusqu'à obtenir une valeur moyenne stabilisée. Les résultats obtenus sont reportés en figures 4.2 et 4.3, qui mettent en évidence l'effet du nombre de tirages (figure 4.2) et du nombre de grains (figure 4.3) sur l'écart à l'isotropie effective de l'agrégat.

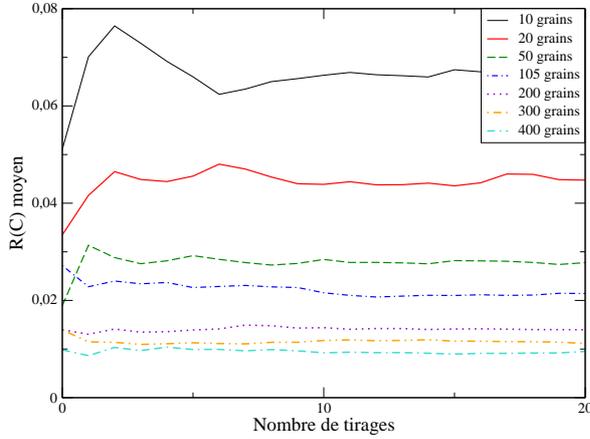


FIGURE 4.2 – Ecart à l'isotropie en fonction du nombre de tirages

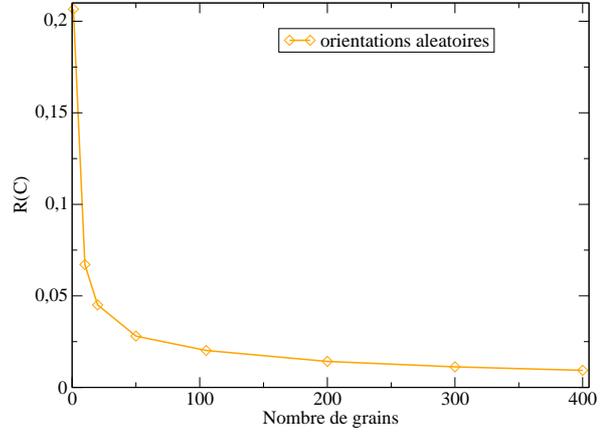


FIGURE 4.3 – Ecart moyen à l'isotropie en fonction du nombre de grains

De façon prévisible, les résultats présentés à la figure 4.3 confirment que l'écart à l'isotropie diminue lorsque le nombre d'orientations cristallines considérées augmente, jusqu'à passer en deçà de 1% pour 400 grains.

Sur la figure 4.2 sont reportées pour chaque taille d'agrégat la moyenne courante de $R(\mathbf{C})$ en fonction du nombre de tirages d'orientations effectués : les courbes obtenues mettent en évidence la diminution progressive des fluctuations de $R(\mathbf{C})$ lorsque le nombre de grains dans l'agrégat augmente. L'écart-type $\langle R(\mathbf{C}) \rangle$ passe de 1,26% pour un agrégat de 10 grains à 0,26% pour 400 grains, ce qui signifie que dans ce dernier cas une réalisation quelconque du tirage d'orientations cristallines permet de retrouver assez fidèlement le comportement effectif moyen de l'agrégat.

Tous ces résultats tendent à démontrer que dans le domaine élastique quelques centaines de grains sont suffisants pour modéliser le comportement effectif de l' UO_2 de façon satisfaisante. Un exemple de tenseur de rigidité effectif obtenu pour un maillage à 400 grains est donné ci-dessous :

$$\mathbf{C}_{\text{UO}_2} = \begin{pmatrix} 3.315e11 & 1.539e11 & 1.526e11 & 3.211e08 & -5.042e08 & 1.591e08 \\ 1.539e11 & 3.311e11 & 1.530e11 & -3.824e08 & -6.159e07 & -1.470e08 \\ 1.526e11 & 1.530e11 & 3.324e11 & 6.138e07 & 5.658e08 & -1.207e07 \\ 3.211e08 & -3.824e08 & 6.138e07 & 8.881e10 & 2.753e08 & -9.642e07 \\ -5.042e08 & -6.159e07 & 5.658e08 & 2.753e08 & 8.763e10 & 3.031e08 \\ 1.591e08 & -1.470e08 & -1.207e07 & -9.642e07 & 3.031e08 & 8.758e10 \end{pmatrix}$$

Les valeurs obtenues sont cohérentes avec celles relevées dans la littérature, comme le montre tableau 4.3.

Localisation Quelques premières observations peuvent être réalisées en matière de localisation du comportement mécanique de l'agrégat. La figure 4.4 présente le tracé d'isovaleurs de contraintes σ_{xx} dans le cas de l'essai de traction dans la direction x ($E_{xx} = 1$, $E_{ij} = 0$ pour $(i, j) \neq (x, x)$) sur un agrégat de 400 grains.

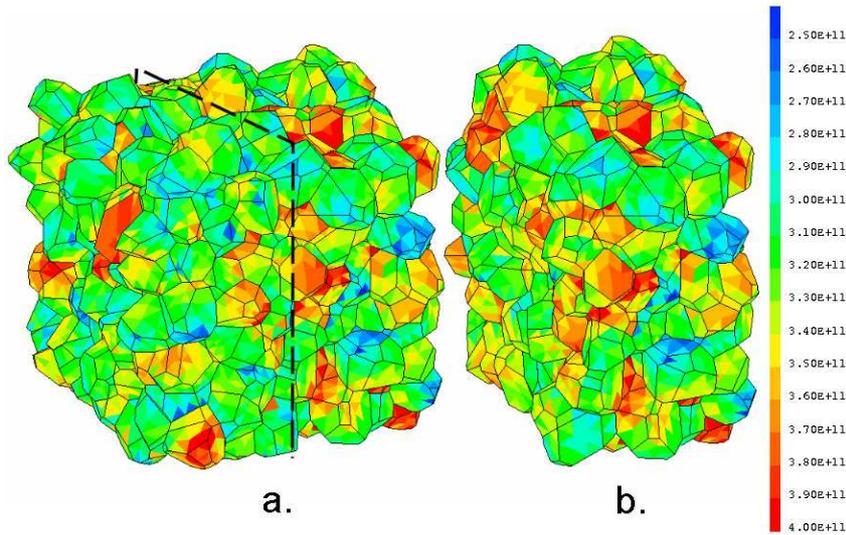
La dispersion des valeurs de contrainte due à l'anisotropie du comportement intragranulaire est significative ($\sigma_{xx} \in [250, 400]$ GPa) par rapport au comportement effectif de l'agrégat, pour

	Modèle d'agrégat	Mesures expérimentales macroscopiques
Module d'Young (GPa)	235	229 [Sauter 01]
Coefficient de Poisson	0.316	0.316

TABLE 4.3 – Comportement effectif de l'agrégat

lequel $\Sigma_{xx} = C_{11}E_{xx} = C_{11}$ ($\simeq 330$ GPa). Les résultats présentés figure 4.4 laissent à penser que l'anisotropie du comportement monocristallin va générer des phénomènes de localisation à l'échelle de l'agrégat qui impacteront les mécanismes de transport de produits de fission gazeux.

Ce premier résultat permet de mettre en évidence l'intérêt d'une modélisation micromécanique, qui permet de prendre en compte des effets de localisation fins laissés de côté par des modèles limités au comportement effectif de l'UO₂. Les gradients de contraintes intragranulaires visualisés sur la figure 4.4 ne peuvent être modélisés que dans le cadre d'une approche à champ complet telle que celle décrite ici.

FIGURE 4.4 – Isovaleurs de σ_{xx} : agrégat (a.) et vue en coupe (b.)

4.1.3.3 Orientations équiréparties

Plutôt que de tirer les orientations aléatoirement, il est possible de générer une texture la plus isotrope possible pour une taille d'agrégat donnée en sélectionnant des orientations équiréparties en tenant compte des propriétés de symétrie du cristal considéré, comme détaillé en annexe B.

Pour chaque taille d'agrégat, une série de calculs a été effectuée avec un jeu d'orientations équi-réparties. Les résultats sont présentés figure 4.5 et comparés à ceux obtenus dans le cas d'orientations réparties aléatoirement. L'écart à l'isotropie $R(\mathbf{C})$ tend vers 0 beaucoup plus rapidement que précédemment : pour un agrégat de 50 grains, $R(\mathbf{C}) \sim 0.2\%$ contre 2.8% dans le cas d'orientations aléatoires.

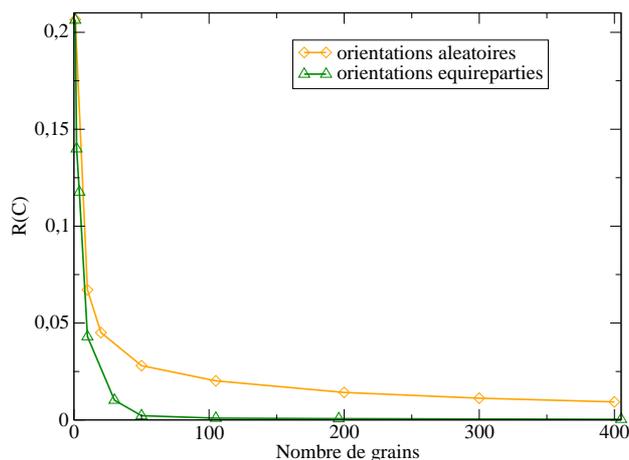


FIGURE 4.5 – Ecart à l’isotropie en fonction du nombre de grains - orientation équireparties

4.1.4 Bilan des résultats obtenus dans le domaine élastique

Cette première étape d’analyse du comportement élastique de l’agrégat a permis en premier lieu de valider la bonne gestion des conditions de périodicité sur le VER. L’analyse du comportement effectif a abouti à la mise en place d’un critère de représentativité du polycristal basé sur une estimation de l’écart du comportement macroscopique à l’isotropie.

Les résultats montrent que quelques centaines de grains sont suffisantes pour représenter fidèlement le comportement du combustible dans le domaine élastique. L’utilisation d’orientations cristallines judicieusement choisies permet de diminuer ce nombre de grains de manière significative, typiquement jusqu’à quelques dizaines.

Une première étude des effets de localisation dus à l’anisotropie des grains a mis en évidence la capacité de la modélisation polycristalline à prendre en compte les effets de la microstructure sur le comportement de l’agrégat. Bien entendu ces résultats doivent être étendus à l’utilisation d’une loi de comportement plus réaliste du combustible, prenant en compte les mécanismes de déformation viscoplastique observés dans la gamme de sollicitations rencontrée par le combustible sous irradiation. Dans cette optique, les paragraphes 4.2 et 4.3 visent à proposer une description de ces mécanismes à l’échelle du monocristal.

4.2 Première approche pour la plasticité cristalline

Il s’agit à présent de décrire le comportement du combustible dans le régime viscoplastique à l’échelle du monocristal. Dans un premier temps, l’étude se limite à la modélisation de la déformation par glissement des dislocations.

Le modèle de plasticité cristalline décrit dans ce paragraphe est principalement inspiré des travaux de [Sauter 01]. Ces travaux se basent sur l’observation expérimentale du pic de contrainte exhibé par des pastilles de combustible soumises à une sollicitation d’écroutissage à des températures de l’ordre de 1000°C, tel que présenté sur la figure 4.6. L’adoucissement observé est en effet caractéristique des matériaux à faible densité de dislocations initiale et peut-être associé à un phénomène “d’avalanche de dislocations” (voir [Bénard 84]) qui sera décrit au paragraphe 4.2.2.1.

Il s’agit donc de décrire la déformation plastique du combustible comme la somme des contributions de glissements des dislocations dans le monocristal. La prise en compte de l’orientation des systèmes de glissement permet de faire intervenir des phénomènes d’incompatibilité de déformation

intergranulaire issus de l'anisotropie du comportement plastique, de la même manière que dans le cas élastique.

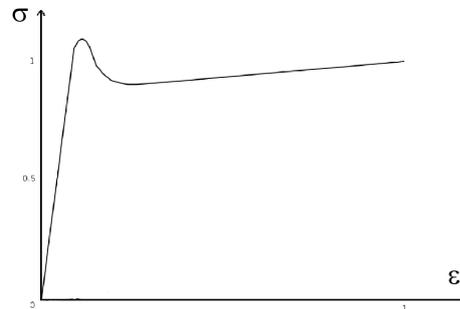


FIGURE 4.6 – Allure expérimentale d'une courbe d'essai d'érouissage

Enfin, une équation cinétique pilotant l'évolution de la densité de dislocation de chaque système permet de simuler la multiplication brutale des dislocations et le pic de contrainte qui y est associé. Ce choix de modélisation permet d'effectuer un remontage entre un paramètre microstructural, la densité de dislocation en l'occurrence, et une observation expérimentale, le pic de contrainte.

Afin de modéliser la déformation due aux glissements de dislocations dans le combustible, il convient de se pencher à nouveau sur les propriétés cristallographiques de celui-ci, déjà décrites brièvement au paragraphe 4.1.1.1. Quelques caractéristiques du cristal d' UO_2 seront débattues dans le paragraphe suivant, afin d'éclairer la nature et le comportement des dislocations, ainsi que les spécificités induites dans le comportement du combustible.

Nous nous attacherons en particulier à la description des principaux systèmes de glissement, qui contribueront dans le cadre de notre modèle à la déformation plastique du polycristal.

4.2.1 Mouvements de dislocations dans l' UO_2

Avant de décrire notre modèle de plasticité cristalline, il convient de présenter quelques spécificités des réseaux de dislocations dans l' UO_2 .

4.2.1.1 Nature des dislocations

Quelques propriétés cristallographiques de l' UO_2 ont déjà été présentées au paragraphe 4.1.1.1 : en particulier la nature ionique du réseau à symétrie cubique composé de deux sous-réseaux de cations U^{4+} et d'anions O^{2-} .

Ce caractère ionique a des répercussions sur la nature des dislocations. Ainsi à la différence des métaux par exemple, les dislocations du dioxyde d'uranium sont constituées non pas d'un mais de deux demi-plans supplémentaires (voir figure 4.7), de façon à assurer la neutralité électronique globale du cristal. Le coeur des dislocations coin possède une charge électrostatique, dont le signe est positif ou négatif selon que les deux demi-plans se terminent soit l'un par une rangée d'anions et l'autre par une rangée de cations, soit tous deux par une rangée d'anions respectivement.

En conséquence, le système de glissement le plus facilement activé dans l' UO_2 correspond à un minimum d'énergie électrostatique, piloté par la concentration locale de charges dans le cristal. La situation est différente dans les aciers par exemple, pour lesquels c'est le plan cristallographique de plus forte densité ($\{1\ 1\ 1\}$ pour un cristal de symétrie cubique à faces centrées), pour lequel l'énergie élastique associée au déplacement de la dislocation d'un cran est minimale, qui est le plus facilement activé.

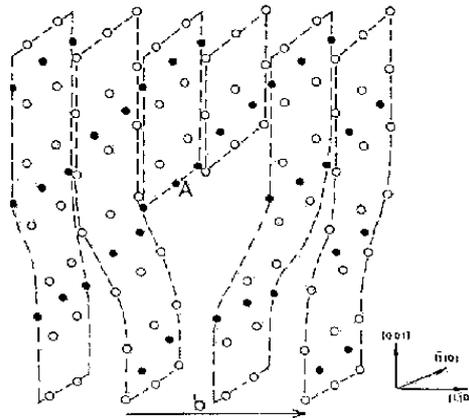


FIGURE 4.7 – Représentation d’une dislocation coin dans un cristal d’ UO_2 [Evans 69]

Par ailleurs il convient aussi de mentionner le caractère semi-conducteur du dioxyde d’uranium : les matériaux de cette famille possèdent une densité de dislocations initiale très faible (typiquement de l’ordre de $1 \cdot 10^8 \text{ m}^{-2}$) ainsi que des forces de friction de réseaux (qui bloquent le mouvement des dislocations) très importantes par rapport aux métaux, deux facteurs qui favorisent l’apparition du pic de contrainte.

4.2.1.2 Systèmes de glissement activés dans l’ UO_2

Des essais mécaniques réalisés sur monocristaux ont permis d’identifier les familles de systèmes de glissement les plus facilement activées pour l’ UO_2 (voir notamment [Alamo 78], [Mordike 76] et [Rapperport 60]). Ainsi, le glissement est le plus fréquemment observé pour la famille $\langle 110 \rangle \{100\}$ (cf. figure 4.9), comme illustré à la figure 4.10. Compte tenu des symétries du cristal, cette famille compte au total 6 systèmes de glissements $[011](100)$, $[0\bar{1}1](100)$, $[101](010)$, $[\bar{1}01](010)$, $[110](001)$ et $[\bar{1}\bar{1}0](001)$.

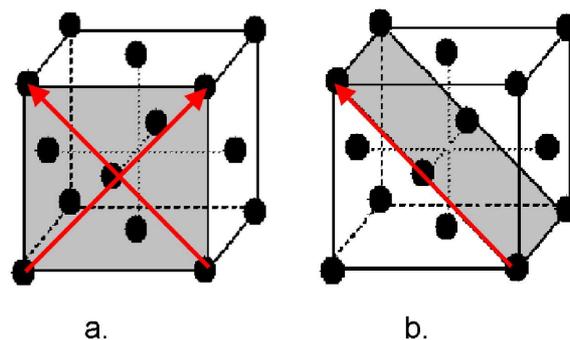


FIGURE 4.8 – Illustration des différents systèmes de glissement activés dans l’ UO_2 : famille $\langle 110 \rangle \{100\}$ (a.) et $\langle 110 \rangle \{110\}$ (b.)

La prise en compte de la deuxième la famille $\langle 110 \rangle \{110\}$ ¹ permet de satisfaire le critère de Von Mises, selon lequel un cristal doit nécessairement contenir 5 systèmes de glissement indépendants pour se déformer par glissement de dislocations. Ces 5 systèmes correspondent en

1. Cette deuxième famille compte 6 systèmes de glissement : $[\bar{1}\bar{1}0](110)$, $[110](\bar{1}\bar{1}0)$, $[0\bar{1}1](011)$, $[011](0\bar{1}\bar{1})$, $[\bar{1}01](101)$, et $[101](\bar{1}01)$.

effet aux 5 degrés de libertés du tenseur de déformation (dans le cas d'une déformation incompressible, pour laquelle il existe une relation entre les termes diagonaux du tenseur) et sont nécessaires pour générer une déformation viscoplastique quelconque par contribution des différents systèmes. Ce critère, défini à l'échelle du monocristal, permet à chaque grain d'accomoder une déformation quelconque dans le régime viscoplastique. En l'absence de cette deuxième famille de systèmes de glissement, l'anisotropie du comportement intragranulaire serait renforcée et l'accomodation ne pourrait se réaliser qu'au niveau du polycristal. Une représentation schématique des deux principales familles de glissement est proposée à la figure 4.8. Les cissions critiques initiales associées à ces deux familles, correspondant aux seuils de contrainte² pour faire entrer en mouvement les dislocations, sont quant à elles présentées à la figure 4.9.

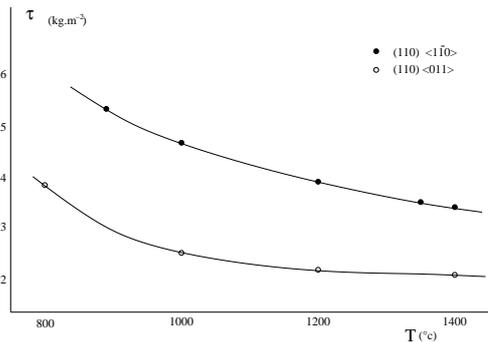


FIGURE 4.9 – Cissions critiques initiales en fonction de la température [Alamo 78]

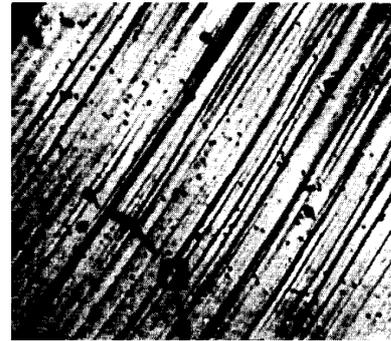
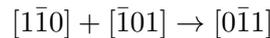


FIGURE 4.10 – Trace de glissement dans un plan (001) pour un grain d'UO₂ [Rapperport 60]

L'activation des systèmes de glissement $\langle 100 \rangle \{111\}$ observée par [Rapperport 60] à haute température n'a pas été prise en compte dans ce modèle. Cette simplification peut mener à une éventuelle surestimation de l'anisotropie du comportement intragranulaire.

Par ailleurs, [Alamo 78] a observé l'interaction entre des dislocations des systèmes $[1\bar{1}0] (001)$ et $[\bar{1}01] (010)$ formant un réseau hexagonal selon la réaction :



Ce type de mécanisme, illustré à la figure 4.11, ne sera pas pris en compte par notre modélisation. De la même manière que pour l'activation des plans $\{111\}$, cette simplification limite les possibilités de glissement et renforce l'anisotropie du comportement du monocristal.

4.2.2 Pic de compression et avalanche de dislocations

Le modèle décrit ici se propose d'associer le pic de compression observé expérimentalement à l'évolution des densités de dislocations dans le matériau. Nous allons maintenant présenter plus dans le détail les éléments constitutif de notre loi de plasticité cristalline et les travaux antérieurs sur lesquels elle se base.

4.2.2.1 Observations sur le pic de compression

Le modèle retenu ici repose sur une hypothèse formulée initialement par [Alexander 68] pour décrire les courbes d'érouissage en compression uniaxiale présentant un pic de contrainte (dit aussi de compression) tel que présenté figure 4.6, et reprise par [Sauter 01] dans le cadre de la modélisation du comportement de l'UO₂.

2. Donnés dans le repère du système.

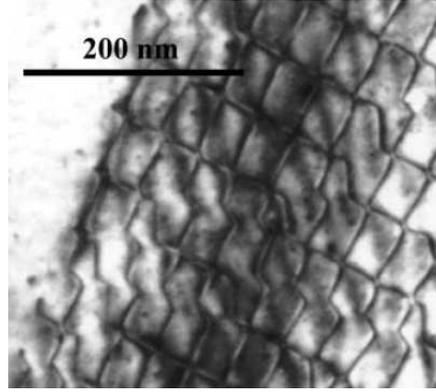


FIGURE 4.11 – Mise en évidence de la présence d’un réseau de dislocations hexagonal au terme d’un essai de compression uniaxiale sur une pastille d’UO₂ polycristallin.

Cette hypothèse est fondée sur l’expression de la relation d’Orowan, telle que démontrée par [Poirier 73] notamment et qui décrit le taux déformation $\dot{\gamma}$ associé au glissement de dislocations :

$$\dot{\gamma} = \rho_m b \bar{v}(\sigma) \quad (4.12)$$

avec :

- ▷ b la norme du vecteur de Burgers associé au glissement (ie. la distance unitaire de glissement d’une dislocation) ;
- ▷ ρ_m la densité de dislocations mobiles ;
- ▷ $\bar{v}(\sigma)$ la vitesse des dislocations ($\bar{v} \propto \sigma^n$).

Lors d’un essai d’érouissage, pour lequel le taux de déformation $\dot{\gamma}$ est imposé constant. Si la densité de dislocations mobiles initiale ρ est faible, il faut atteindre des contraintes élevées pour que la vitesse des dislocations vérifie l’équation (4.12). Si la contrainte atteint le seuil d’ancrage pour lequel est libéré un flux de dislocations mobiles susceptibles de participer au glissement, l’augmentation de ρ impose que \bar{v} (et donc la contrainte) diminue.

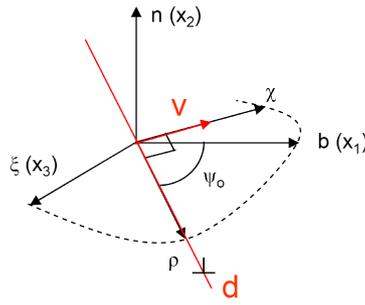
4.2.2.2 Equations constitutives de la loi PC_U

Les éléments présentés dans les paragraphes précédents sont repris dans un modèle de plasticité cristalline classique appelé PC_U (pour Plasticité Cristalline dans le dioxyde d’Uranium) qui prend en compte les deux familles principales de systèmes de glissement de l’UO₂ (voir paragraphe 4.2.1.2).

Nous nous limitons dans un premier temps à la modélisation de la déformation par glissement des dislocations. L’extension du modèle au domaine des hautes températures, pour lequel les mécanismes de montée de dislocations contrôlés par la diffusion deviennent actifs, sera abordée à la section 4.3.

La déformation plastique est définie comme la somme des contributions des S systèmes de glissement de dislocations et donnée par l’équation (4.13) :

$$\dot{\varepsilon}^{\text{dis}} = \sum_{s \in S} \mathbf{m}_s \dot{\gamma}_s \quad (4.13)$$


 FIGURE 4.12 – Repère local associé à une dislocation mixte ρ [Lebensohn 09]

A chaque système de glissement s correspond un tenseur d'orientation de Schmid \mathbf{m}_s . Si \mathbf{n}_s est le vecteur normal au plan de glissement (voir figure 4.12) et \mathbf{l}_s le vecteur unitaire de glissement (parallèle au vecteur de Burgers), le tenseur d'orientation est défini par :

$$\mathbf{m}_s = \frac{1}{2} (\mathbf{l}_s \otimes \mathbf{n}_s + \mathbf{n}_s \otimes \mathbf{l}_s) \quad (4.14)$$

Il est important de noter que seul le glissement des dislocations étant pris en compte, le tenseur d'orientation ne dépend que du vecteur de Burgers et de la normale au plan de glissement qui définissent le système. La direction de la ligne de dislocation, qui définit son caractère vis ou coin, n'intervient pas et toutes les dislocations quel que soit leur type sont traitées de la même manière. Le taux de cisaillement est donné à partir de la loi d'Orowan (4.12) avec :

$$\dot{\gamma}_s = b\rho_s v(\boldsymbol{\sigma}) = b\rho_s \dot{\gamma}_s^0 \left(\frac{\tau_s^*}{\tau_{i_s}} \right)^m \text{sgn}(\tau_s) \quad (4.15)$$

$$\tau_{i_s} = \tau_0 e^{\frac{-RT}{Q_{0s}}} + \alpha\mu b \sqrt{\sum_{r \in S} A_{rs} \rho_r} \quad (4.16)$$

$$\tau_s = \mathbf{m}_s : \boldsymbol{\sigma} \quad (4.17)$$

$$\tau_s^* = \max(0; |\tau_s| - \tau_{i_s}) \quad (4.18)$$

où :

- ▷ $\text{sgn}(X) = \frac{X}{|X|}$ est la fonction signe ;
- ▷ ρ_s est la densité de dislocations dans le système s ;
- ▷ τ_s est la contrainte de cisaillement perçue par s ;
- ▷ τ_0 est la cission critique initiale associée à s ;
- ▷ τ_{i_s} est la contrainte interne associée à s ;
- ▷ A_{rs} est le terme général de la matrice d'écrouissage intragranulaire ;
- ▷ $\dot{\gamma}_s^0$ est le module de vitesse de dislocations ;
- ▷ b est la norme du vecteur de Burgers associé au glissement ;
- ▷ μ est le module de cisaillement élastique³
- ▷ R est la constante des gaz parfaits ;
- ▷ T est la température absolue ;
- ▷ Q_{0s} est l'énergie d'activation associée au glissement des dislocations ;

3. **Note :** Quelques résultats préliminaires ayant montré la prédominance de l'anisotropie due à la plasticité cristalline par rapport au régime élastique, l'anisotropie élastique est ignorée dans le cadre de cette première modélisation de la déformation viscoplastique. Les valeurs numériques des constantes d'élasticité utilisées pour tous les calculs réalisés avec le modèle PCU (voir plus loin) seront données au tableau 4.5.

▷ α est un paramètre numérique du modèle.

Il convient ici de signaler que ce modèle reprend l'hypothèse de densité de dislocation totale proposée par [Alexander 68] : aucune distinction n'est faite entre dislocations fixes et mobiles, et toutes les dislocations sont supposées contribuer à la déformation. Cette hypothèse forte, déjà utilisée par Sauter pour l' UO_2 , limite l'interprétation physique de la densité de dislocations telle qu'elle est définie en tant que variable interne du modèle. Cette première approche phénoménologique permet toutefois une bonne description du pic de contrainte.

L'équation 4.16 modélise l'écroûissage lié à la multiplication des dislocations. Le comportement du matériau est donc piloté par l'équilibre entre l'effet adoucissant dû à l'avalanche de dislocations - qui augmente la contribution du glissement plastique dans la déformation totale - et l'effet d'écroûissage dû aux interactions entre dislocations, qui est pris en compte à travers la matrice \mathbf{A} . Dans le cadre du modèle développé ici le terme général de \mathbf{A} est donné par $A_{rs} = h_{lat} + (1 - h_{lat}) \delta_{rs}$, où δ_{ij} est le symbole de Kronecker et h_{lat} le paramètre d'écroûissage entre systèmes de glissement.

L'ensemble des phénomènes d'interaction entre les dislocations des différents systèmes de glissement est paramétré en première approximation⁴ par le seul terme h_{lat} , compris entre 0 (aucune interaction entre les systèmes) et 1 (les interactions entre dislocations d'un même système ou de systèmes différents sont égales). En l'absence d'une caractérisation expérimentale fine des structures de dislocations dans l' UO_2 , les différents types d'interactions ne sont pas différenciés et tous les systèmes sont équivalents les uns par rapport aux autres en terme d'écroûissage.

Il reste maintenant à se donner une loi d'évolution cinétique pour les densités de dislocations. Le modèle retenu est le modèle de Kocks-Mecking (voir par exemple [Estrin 84]) qui peut se mettre sous la forme suivante :

$$\frac{d\rho_s}{d\gamma_s} = c_1\sqrt{\rho_s} - c_2\rho_s \quad (4.19)$$

avec c_1 et c_2 paramètres du modèle, décrivant la compétition entre le terme de stockage athermique (qui sera d'autant plus important que le libre parcours moyen des dislocations $\rho^{-1/2}$ sera faible) et la restauration dynamique des dislocations.

Une fois encore un certain nombre d'hypothèses simplificatrices ont été adoptées, de façon à pallier le manque d'éléments expérimentaux caractérisant les dislocations dans l' UO_2 . En particulier, la dépendance du terme de restauration dynamique (par montée ou annihilation de dislocations) à la température n'a pas été prise en compte. Si en réalité l'équation 4.19 semble avant tout adaptée à la modélisation de l'évolution de la densité de dislocations fixes, elle reste cohérente avec l'approche phénoménologique des densités de dislocations développée pour ce modèle et basée sur l'hypothèse de densité de dislocation totale.

4.2.2.3 Systèmes de glissement dans le modèle PC_U

Du fait d'une mauvaise compréhension des données expérimentales, les directions de glissement associées aux systèmes de glissement de dislocations dans le modèle PCU ne sont pas les bonnes. La figure 4.13 présente les directions de glissement effectivement définies dans le modèle PCU.

D'après la figure 4.13, il apparaît notamment que le nombre de systèmes de glissement associés à la deuxième famille est beaucoup plus important que dans la réalité . Toutefois, ces modifications n'impactent pas significativement le comportement du modèle dans la mesure où le rôle de chaque famille de systèmes de glissement reste inchangé en termes d'accomodation des déformations :

4. Usuellement, on considère que 4 coefficients a_i sont nécessaires pour caractériser la matrice \mathbf{A} dans le cas d'un cristal cubique [Franciosi 84]. Ces quatres coefficients sont associés respectivement à la formation de jonction fixes, aux jonctions mobiles, à l'absence de jonctions et à l'autoécrouissage.

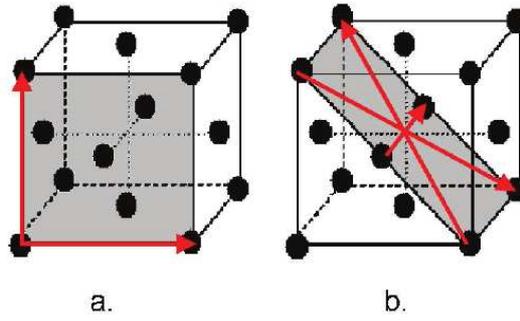


FIGURE 4.13 – Directions de glissements dans le modèle PC_U : famille $\langle 110 \rangle \{100\}$ (a.) et $\langle 110 \rangle \{110\}$ (b.)

- Dans les deux cas, les systèmes de glissement de la première famille permettent d’accomoder les déformations de cisaillement ($\varepsilon_{12}, \varepsilon_{13}, \varepsilon_{23}$) imposées au monocristal ;
- La deuxième famille permet donc principalement d’accomoder les déformations axiales. Bien que la deuxième famille de systèmes de glissement puisse aussi générer des déformations de cisaillement avec les directions de glissement définies à la figure 4.13 (ce qui n’est pas le cas avec les directions de glissement observées expérimentalement), des calculs effectués à posteriori démontrent néanmoins que cette contribution reste négligeable par rapport à l’activité de la première famille de systèmes de glissements.

De façon générale, les résultats de simulations polycristallines tendent à montrer que, dans le cas d’un matériau non texturé, la modification des directions de glissement a une influence faible (de l’ordre de quelques %) tant sur le comportement effectif du VER que sur les propriétés statistiques des distributions de contraintes locales.

4.2.2.4 Anisotropie du modèle PC_U

Du fait de la présence d’un seuil d’activation (voir équation (4.18)) pour les différentes familles de systèmes de glissement et de l’orientation de ces systèmes (laquelle “contrôle” la contrainte perçue par le système) la loi PC_U est par essence anisotrope. La figure 4.14 présente le seuil d’activation plastique dans le plan des contraintes principales (σ_x, σ_y) pour différentes valeurs du premier angle d’euler ϕ_1 , correspondant ici à une rotation autour de l’axe (O_z).

Bien entendu la symétrie cubique est retrouvée et une rotation de type $\Delta\phi_1 = n\frac{\pi}{2}$ ne modifie pas la réponse du monocristal. Par ailleurs, en fonction des orientations prises par le grain, la valeur du seuil d’activation peut varier d’un facteur 2.

Comme nous le verrons par la suite, ce résultat aura des conséquences significatives du point de vue de l’incompatibilité entre grains voisins. En effet, il est aisé de prévoir que deux grains adjacents ayant des orientations différentes auront du fait de cette anisotropie une réponse différente à une même sollicitation macroscopique. L’effet de cette incompatibilité et ses conséquences notamment sur le comportement des joints de grains seront abordés dans les parties III et IV.

4.2.3 Identification des paramètres du modèle PC_U

Il reste encore à identifier les paramètres de la loi PC_U présentée dans les paragraphes précédents. Ces paramètres peuvent être classés en deux catégories :

- ceux qui désignent une grandeur physique mesurable expérimentalement, comme par exemple une contrainte seuil ou une densité de dislocations ;

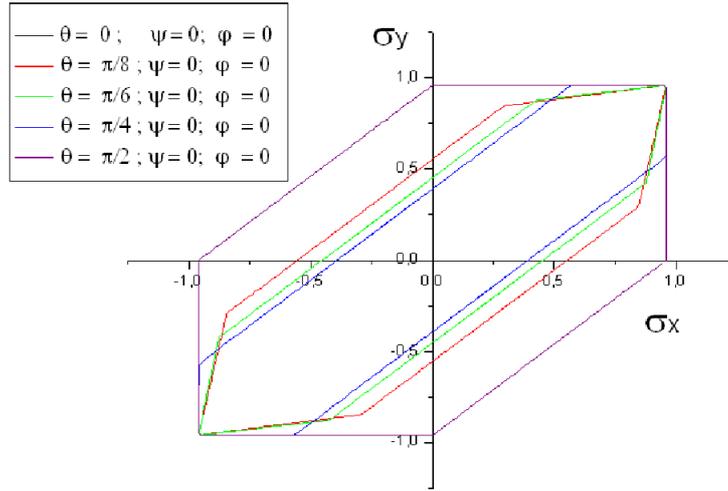


FIGURE 4.14 – Seuil de plasticité pour différentes orientations

- ceux directement associés à la formulation du modèle, comme le module de vitesse $\dot{\gamma}_s^0$ ou les paramètres de l'équation cinétique (4.19), qui doivent être identifiés numériquement.

Afin d'être le plus fidèle possible à la réalité physique du matériau il a été fait appel aux données expérimentales dès lors qu'elles étaient disponibles. En particulier les cissions critiques résolues des deux familles de systèmes de glissement τ_0^1 et τ_0^2 ont été identifiées directement à partir des mesures sur monocristaux [Alamo 78] sous la forme $\tau_0^i = \tau_0^i e^{-\frac{RT}{Q_{0s}}}$, comme illustré à la figure 4.15.

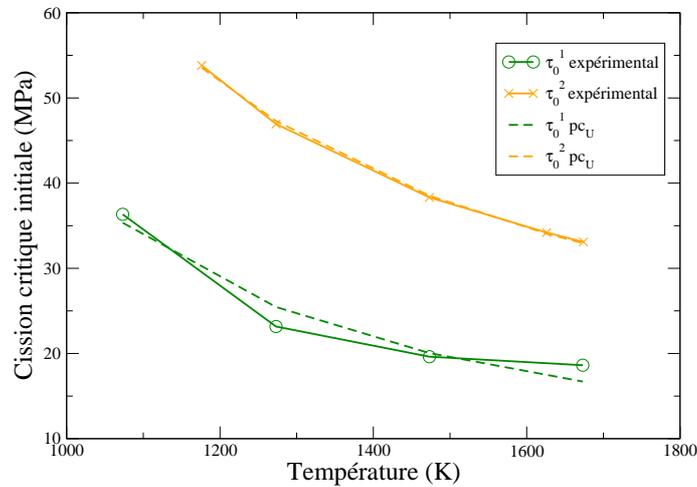


FIGURE 4.15 – Identification des cissions critiques initiales à partir des données expérimentales

Certains paramètres ont par ailleurs directement été repris du travail de [Sauter 01] lorsque c'était possible. Il s'avère malgré tout que la caractérisation expérimentale du comportement viscoplastique de l' UO_2 à l'échelle du monocristal est largement incomplète et une procédure d'identification numérique a dû être mise en place pour les paramètres restants ($\dot{\gamma}_s^0$, m , c_1 , c_2).

La méthode retenue pour l'identification numérique est similaire à celle proposée par [Gérard 08] : le comportement intragranulaire est identifié sur des simulations polycristallines, dont les résultats sont comparés à des mesures expérimentales. Une première série de calculs de pré-identification a été menée en mettant en œuvre la formulation auto-cohérente décrite au paragraphe 3.1.1. Des simulations par éléments finis faisant appel au jeu de paramètres issu de cette

première identification permettent l'ajustement et la validation du modèle intragranulaire.

4.2.3.1 Caractérisation des essais référence

L'essentiel des développements présentés au cours de ce paragraphe vise à la modélisation du pic de contrainte observé pour des essais à Déformation à Vitesse Constante sur des pastilles de dioxyde d'uranium. Par conséquent, l'identification est basée sur la réponse du modèle à une sollicitation de ce type.

Essai	T (°C)	$\dot{\varepsilon}$ (%.h ⁻¹)	t_{fin} (s)	$\varepsilon(t = t_{fin})$
V298	858	9.02	1000	2.506 %
V299	1120	9.150	1000	2.552 %

TABLE 4.4 – Caractéristiques des essais à Déformation à Vitesse Constante

Les caractéristiques des essais expérimentaux utilisés pour la procédure sont données au tableau 4.4. En l'absence de caractérisation du comportement micromécanique de la pastille, l'identification porte uniquement sur le comportement effectif $\Sigma_{zz}(t)$ du VER.

4.2.3.2 Méthode d'identification avec l'approche auto-cohérente

L'identification numérique est réalisée avec une méthode de Levenberg-Marquardt [Moré 78], implémentée à partir de la GNU Scientific Library. Rappelons que cette méthode consiste à minimiser une fonctionnelle $\Phi(\mathbf{x})$ de la forme suivante :

$$\Phi(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{F}(\mathbf{x})\|^2 = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n f_i(x_1, \dots, x_p)^2 \quad (4.20)$$

Ici le vecteur \mathbf{x} correspond aux paramètres du modèle à identifier et $f_i(\mathbf{x}) = \Sigma_{zz}^{exp}(i) - \Sigma_{zz}^{sim}(i)$. Les valeurs de contrainte effective Σ_{zz}^{exp} mises en jeu pour l'identification sont le pic de contrainte (défini comme $\max_t |\Sigma_{zz}(t)|$) et l'état stationnaire du polycristal ($\Sigma_{zz}(t = t_{final})$).

Dans le cadre de notre étude, les valeurs $\Sigma_{zz}^{sim}(t_i)$ sont obtenues en réalisant des simulations avec la formulation auto-cohérente décrite au paragraphe 3.1.1. Le VER retenu est constitué de 40 phases cristallines dont les orientations ont été choisies équiréparties, en tenant compte de la symétrie cubique du comportement mécanique intragranulaire (voir annexe B pour plus de détails). Le fait d'utiliser une texture la plus isotrope possible permet d'optimiser la représentativité du comportement effectif du polycristal retenu. Cette démarche, novatrice dans le cadre d'une méthode d'identification, permet d'améliorer significativement les temps de calculs associés aux nombreuses simulations réalisées.

Par ailleurs, le jacobien de la fonction $\mathbf{F}(\mathbf{x})$ n'étant pas directement accessible, il est approximé par une méthode par différences finies (4.21).

$$\frac{\partial F}{\partial x_j}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2\varepsilon} (F((x_1, \dots, x_j + \varepsilon, \dots, x_p)) + F((x_1, \dots, x_j - \varepsilon, \dots, x_p))), \quad \varepsilon \ll x_j \quad (4.21)$$

La mise en œuvre de l'algorithme présente des difficultés liées à la définition du jeu de paramètres initial, en particulier en ce qui concerne les termes "cinétiques" c_1 et c_2 pour lesquels il est difficile de prédire une valeur acceptable. Une autre difficulté liée au processus itératif est de

travailler dans un cadre d'optimisation sous contrainte, pour lequel il est nécessaire de s'assurer qu'à chaque pas le jeu de paramètres reste dans un domaine de valeurs admissibles, compatibles avec la loi de comportement. Pour ces raisons, les résultats de l'identification numérique ont été affinés manuellement au cours d'une étape de finalisation.

Les résultats de l'identification permettent in fine une bonne représentation du pic de contrainte expérimental, comme l'illustre la figure 4.16. Rappelons ici que l'identification ne porte que sur la hauteur (contrainte maximale) et l'amplitude (contrainte en régime stationnaire) du pic. Le décalage en temps observé entre les résultats de simulation et les mesures expérimentales est lié à la modélisation du comportement élastique intragranulaire : les valeurs utilisées pour le calcul, présentées au tableau 4.1 et qui correspondent à des mesures réalisées à 25°C, aboutissent à un comportement élastique trop raide du VER. Pour cette raison, le niveau de contrainte associé à l'activation du glissement, et donc au pic de contrainte, est atteint plus rapidement dans le cas de la simulation que pour le matériau réel.

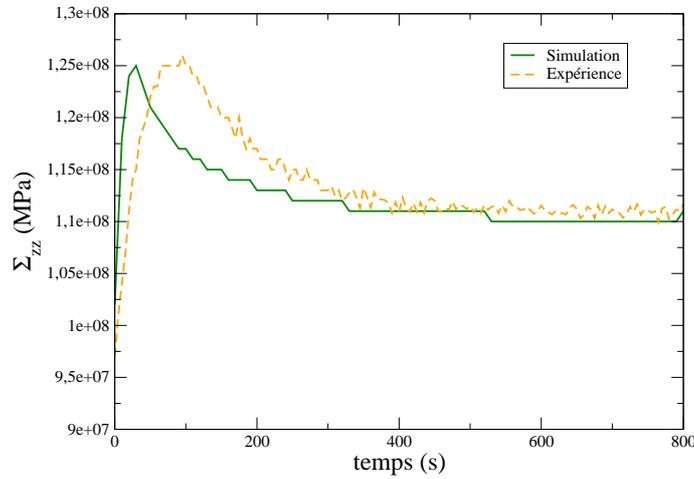


FIGURE 4.16 – Contrainte effective Σ_{zz} au cours du temps : données expérimentales et résultats de la simulation après identification des paramètres

Les valeurs numériques des paramètres identifiés sont données au tableau 4.5. Les paramètres obtenus via l'identification numérique sont signalés par (*), tandis que pour les autres la référence bibliographique d'où leur valeur est tirée est précisée.

4.2.4 Analyse des résultats obtenus avec le modèle PC_U

4.2.4.1 Premiers résultats dans le domaine visco-plastique

Le modèle PC_U présenté dans ce paragraphe a permis une première description des mécanismes de déformation viscoplastique liés au glissement des dislocations dans le combustible. Parmi les principales caractéristiques du modèle il faut citer :

- l'anisotropie induite par les systèmes de glissement, qui dans le cas du polycristal peut générer des surcontraintes par incompatibilité intergranulaire ;
- la corrélation entre l'évolution des densités de dislocations dans le cristal et le phénomène de pic de contrainte observé expérimentalement.

Concernant ce second point, il est nécessaire de revenir sur la formulation du modèle PC_U . Lorsque le seuil d'activation (4.18) est atteint pour un système s donné, le glissement généré se met sous la forme :

$$\dot{\gamma}_s = b\rho_s\dot{\gamma}_s^0 \left(\frac{\tau_s^*}{\tau_{i_s}} \right)^m \operatorname{sgn}(\tau_s) \quad (4.22)$$

Le cisaillement (4.22) provoque une augmentation de la densité de la dislocations à travers l'équation cinétique :

$$\dot{\rho}_s = |\dot{\gamma}_s| (c_1\sqrt{\rho_s} - c_2\rho_s) \quad (4.23)$$

La présence du terme ρ_s dans l'équation (4.22) génère un phénomène d'émulation entre le cisaillement et la densité de dislocations, qui correspond à l'avalanche de dislocation à la base du modèle. Deux mécanismes limitent ce processus : l premier d'entre eux est l'écroissage intragranulaire (4.16), dont la forme est rappelée ici.

$$\tau_{i_s} = \tau_0 e^{\frac{-RT}{Q_{0s}}} + \alpha\mu b \sqrt{\sum_{r \in S} A_{rs}\rho_r} \quad (4.24)$$

Les interactions entre systèmes de dislocations, modélisées par la matrice \mathbf{A} , seront d'autant plus fortes que la densité de dislocation sera élevée. Ces interactions limitent la quantité de glissement définie par (4.22).

Le deuxième mécanisme limitant est la compétition entre les deux termes de génération (respectivement d'annihilation) de dislocations décrite par l'équation (4.23) définit une valeur seuil de densité de dislocations, pour laquelle les deux mécanismes se compensent :

$$\rho_\infty = \left(\frac{c_1}{c_2} \right)^2 \quad (4.25)$$

La densité de dislocations n'évolue pas au-delà de la valeur ρ_∞ , ce qui correspond à l'état de "saturation" du modèle.

Notons qu'en l'absence de mesures expérimentales sur un monocristal, cette corrélation entre le pic de contrainte et la densité de dislocations reste une hypothèse de modélisation. Il serait en effet possible d'imaginer d'autres mécanismes responsables de cet effet adoucissant, en particulier à l'échelle du polycristal⁵.

Malgré tout, la procédure d'identification numérique présentée au paragraphe 4.2.3 a permis d'aboutir à une bonne représentation du pic de compression expérimental avec le jeu de paramètres présenté au tableau 4.5.

Comme nous allons le voir à présent, cette première modélisation du comportement viscoplastique du combustible n'est pas suffisante pour représenter fidèlement le comportement de l'UO₂ sous irradiation.

4.2.4.2 Limites du modèle PC_U pour le comportement en fluage stationnaire

Afin d'analyser le comportement du polycristal d'UO₂ lors d'une irradiation en rampe de puissance, il convient de modéliser correctement les mécanismes de fluage sur toute la gamme de sollicitations associée à ce régime. Malheureusement le modèle PC_U s'avère insuffisant pour représenter fidèlement le comportement du combustible sur l'ensemble de ce domaine.

D'après les éléments présentés au chapitre 2 plusieurs aspects du comportement en fluage de l'UO₂ ont été laissés de côté dans le cadre du modèle PC_U. C'est le cas du fluage par diffusion

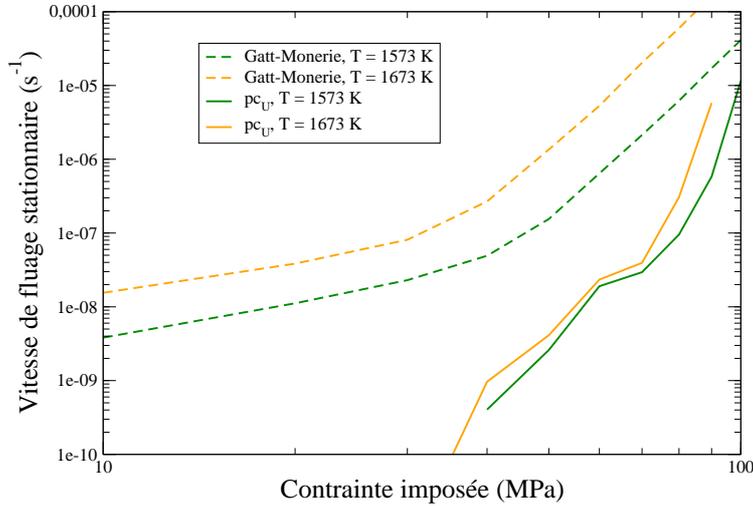
5. On peut notamment envisager un mécanisme de rotation des grains, selon lequel chaque grain se réoriente de façon à favoriser le glissement des dislocations, à densité de dislocations constante.

Paramètre	E (Pa)	ν (Pa)	$\dot{\gamma}_s^0$ (s^{-1})	m	h_{lat}
Valeur	202.3e11	0.316	1.e-12	6.33	0.6874
Source	[Sauter 01]	[Sauter 01]	*	*	[Sauter 01]
Paramètre	c_1	c_2	τ_{01} (Pa)	Q_{01} (J)	τ_{02} (Pa)
Valeur	1.e7	1.e3	2.48e6	-2.26071e4	8.03136e6
Source	*	*	[Alamo 78]	[Alamo 78]	[Alamo 78]
Paramètre	Q_{02} (J)	α	b (m)	ρ_0 (m^{-2})	
Valeur	-1.77571e4	1.48	2.735e-10	2.e6	
Source	[Alamo 78]	[Sauter 01]	[Sauter 01]	[Sauter 01]	

 TABLE 4.5 – Paramètres du modèle PC_U

de lacunes, mécanisme principal de déformation du dioxyde d'uranium dans le domaine des basses contraintes, basses températures. De même, le rôle de la montée de dislocations, activée à haute température et qui augmente la contribution du glissement n'a pas encore été abordé.

Une série de simulation d'essais de fluage a mis en évidence les limites de ce premier modèle. La figure 4.17 présente les vitesses de fluage stationnaire obtenues pour l'agrégat comparées aux résultats issus de la loi Gatt-Monerie.


 FIGURE 4.17 – Vitesse de fluage stationnaire en fonction de la contrainte imposée : comparaison entre les loi Gatt-Monerie et PC_U

Plusieurs constats apparaissent rapidement :

- en l'absence de fluage diffusion, le modèle PC_U est incapable de retranscrire le comportement basses contraintes, basses températures du combustible ;
- le seul terme $\tau_0^i = \tau_0^i e^{\frac{-RT}{Q_{0s}}}$ n'est pas suffisant pour retranscrire convenablement la dépendance à la température du comportement de l' UO_2 ;
- la non-linéarité du modèle PC_U est beaucoup plus importante que celle de la loi macro-

scopique de référence.

Ce dernier aspect illustre la difficulté de corrélérer l'exposant local m de la loi d'écoulement et l'exposant "effectif" à l'échelle du polycristal sur laquelle nous reviendrons plus tard.

Toutes ces raisons nous amènent à proposer une nouvelle loi de fluage du monocristal de dioxyde d'uranium, qui sera décrite dans le paragraphe suivant.

4.3 Modélisation du fluage intragranulaire

L'objectif de cette section est de décrire un nouveau modèle de fluage de l' UO_2 permettant de simuler le comportement du monocristal sur l'ensemble de la gamme de sollicitation rencontrée pendant l'irradiation. D'après les éléments mis en place précédemment, nous pouvons déjà écrire cette loi sous la forme :

$$\dot{\epsilon}^{\text{ld}_2} = \dot{\epsilon}^{\text{dif}} + \dot{\epsilon}^{\text{dislo}} \quad (4.26)$$

Le fluage intragranulaire s'écrit donc comme la somme d'une contribution due à la diffusion de lacunes et d'une deuxième contribution, due quant à elle au mouvement des dislocations à haute température. Pour cette raison cette loi sera appelée par la suite ld_2 (Loi Diffusion / Dislocations).

4.3.1 Prise en compte du fluage-diffusion

Comme décrit au paragraphe 2.2, le terme de fluage-diffusion recouvre en réalité un certain nombre de mécanismes de fluage dont la caractéristique commune est que la déformation y est générée par un flux de lacunes. L'application d'une contrainte à la surface d'un cristal modifie les concentrations locales de lacunes et le flux issu de ce gradient génère la déformation.

En toute rigueur, la modélisation de ce mécanisme nécessite de résoudre un problème couplé de mécanique / diffusion pour lequel les concentrations en lacunes à la surface du grain sont contrôlées par la contrainte locale. Dans notre cas toutefois nous nous sommes limités à une approche macroscopique classique du fluage diffusion et, en accord avec [Vivant-Duguay 98], c'est le modèle de Coble (fluage par diffusion aux joints de grains) qui a été retenu. Comme nous l'avons décrit au chapitre 2, ce modèle permet de rendre mieux compte du fluage de l' UO_2 dans le domaine des basses contraintes qu'un modèle de type fluage par diffusion dans le volume.

L'équation d'écoulement peut se mettre sous la forme 4.27 :

$$\dot{\epsilon}^{\text{dif}} = \frac{C_d}{d^3} e^{\frac{-Q_d}{RT}} \sigma \quad (4.27)$$

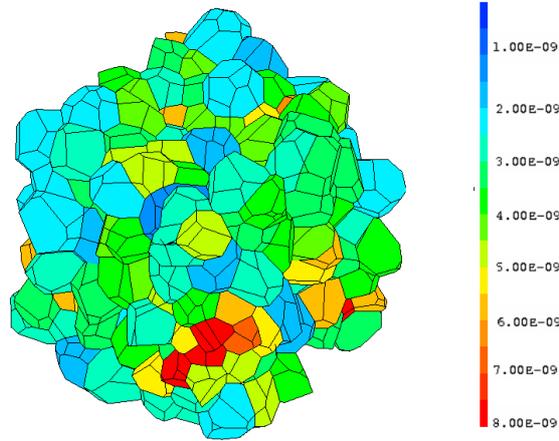
avec :

- ▷ C_d le coefficient de diffusion aux joints de grains ;
- ▷ d la taille de grain ;
- ▷ Q_d l'énergie d'activation associée à la diffusion surfacique dans l' UO_2 ;
- ▷ R la constante des gaz parfaits.

A ce stade l'information microstructurale se limite à la taille de grain d , qui affecte la vitesse de fluage comme l'illustre la figure 4.18 : d'un grain à l'autre, la vitesse de fluage à contrainte donnée peut varier d'un facteur 10 en fonction du temps mis par les lacunes pour traverser le grain.

L'anisotropie associée à la morphologie des grains, qui influe sur le temps de parcours des lacunes, a donc été négligée en première approximation.

Nous allons maintenant décrire le fluage dislocations. Pour cela nous allons nous baser sur les développements présentés aux paragraphes précédents pour la loi PC_U .


 FIGURE 4.18 – Coefficient de proportionnalité $\frac{C_d}{d^3}$ pour un agrégat à 200 grains

4.3.2 Modification du fluage-dislocations

4.3.2.1 Effet d'activation thermique et prise en compte de la diffusion

Le modèle PC_U présenté au paragraphe précédent a été développé pour la modélisation de la plasticité cristalline dans l' UO_2 . S'il s'avère adapté pour simuler le comportement du combustible dans un domaine de basses températures, hautes contraintes (typiquement $(\sigma, T) \in [60; 300] \text{ MPa} \times [900; 1300]^\circ\text{C}$), les résultats de calculs présentés à la figure 4.17 mettent en évidence son incapacité à représenter fidèlement le fluage-dislocations, présenté au paragraphe 2.2, et actif pour des températures supérieures à 1400°C .

Deux hypothèses principales peuvent être envisagées pour la prise en compte des phénomènes de montée de dislocations : soit modéliser une déformation par montée pure (modèle de Nabarro) soit considérer que le fluage est dû au glissement des dislocations, ce dernier étant contrôlé par la montée.

Bien qu'une formulation novatrice de la déformation des polycristaux par montée et glissement de dislocations ait récemment été proposée par [Lebensohn 09], il semble difficile d'étendre la loi PC_U à ce type de formulation. En effet la prise en compte des densités de dislocations en tant que variables internes du modèle implique de réécrire intégralement la partie cinétique du modèle (équation 4.19), laquelle faisait déjà intervenir un terme de restauration dynamique.

En l'absence de preuves expérimentales de la déformation de l' UO_2 par montée pure de dislocations, l'hypothèse de glissement contrôlé par la montée a été retenue, conformément à la littérature [Maillard 08], [Dherbey 00]. L'activation thermique associée à la montée a donc été prise en compte sous la forme $\dot{\gamma}_s^0 \rightarrow \dot{\gamma}_s^0 e^{-\frac{Q_g}{RT}}$, avec Q_g l'énergie d'activation associée à la montée.

Après avoir statué sur l'influence de la température sur le mouvement des dislocations, il reste à nous pencher sur la mise en équation du seuil d'activation en glissement.

4.3.2.2 Seuil d'activation du glissement et fluage stationnaire

Comme cela a déjà été brièvement décrit au paragraphe 4.2.4.2, l'autre difficulté majeure de l'extension de la loi PC_U à la modélisation du fluage-dislocations du dioxyde d'uranium est la corrélation entre l'exposant effectif M du VER et le paramètre m de la loi d'écoulement. En particulier, les résultats préliminaires montrent que $M > M^{gm} > m$ où M^{gm} est l'exposant de la

loi Gatt-Monerie.

Il s'avère en fait que la présence du terme $(|\tau_s| - \tau_{i_s})$ dans l'équation (4.15), perturbe la réponse du monocristal au voisinage du seuil τ_{i_s} . Par la suite, l'équation d'écoulement associée à chaque système de glissement sera donc écrite sous la forme suivante :

$$\dot{\gamma}_s = \dot{\gamma}_s^0 e^{\frac{-Q_g}{RT}} \rho_s \left(\frac{|\tau_s|}{\tau_{i_s}} \right)^m \text{sgn}(\tau_s) \quad (4.28)$$

avec les mêmes notations que précédemment.

4.3.3 Identification des paramètres du modèle ld₂

Il nous reste maintenant à identifier les paramètres du modèle selon une démarche similaire à celle présentée au paragraphe 4.2.3.

4.3.3.1 Formulation finale du modèle

Les équations constitutives du modèle ld₂ sont rappelées ci-dessous (équations (4.29) à (4.37)). Ce modèle s'appuie sur la connaissance expérimentale des mécanismes de fluage à l'échelle du monocristal d'UO₂. Les principales simplifications effectuées concernent la modélisation du fluage par diffusion de lacunes (pour lequel l'effet de la morphologie des grains sur le trajet de diffusion n'a pas été pris en compte) et l'hypothèse de glissement contrôlé par la montée dans le cas du fluage dislocations.

$$\text{Fluage total} \quad \dot{\epsilon}^{\text{ld}_2} = \dot{\epsilon}^{\text{tot}} - \mathbf{C}^{-1} \dot{\boldsymbol{\sigma}} = \dot{\epsilon}^{\text{dif}} + \dot{\epsilon}^{\text{dislo}} \quad (4.29)$$

$$\text{Fluage diffusion} \quad \dot{\epsilon}^{\text{dif}} = \frac{C_d}{d^3} e^{\frac{-Q_d}{RT}} \sigma \quad (4.30)$$

$$\text{Fluage dislocations} \quad \dot{\epsilon}^{\text{dislo}} = \sum_{s \in S} \mathbf{m}_s \dot{\gamma}_s \quad (4.31)$$

$$\text{Tenseur d'orientation} \quad \mathbf{m}_s = \frac{1}{2} (\mathbf{l}_s \otimes \mathbf{n}_s + \mathbf{n}_s \otimes \mathbf{l}_s) \quad (4.32)$$

$$\text{Loi d'orowan} \quad \dot{\gamma}_s = \dot{\gamma}_s^0 e^{\frac{-Q_g}{RT}} \rho_s \left(\frac{|\tau_s|}{\tau_{i_s}} \right)^m \text{sgn}(\tau_s) \quad (4.33)$$

$$\text{Contrainte locale} \quad \tau_s = \mathbf{m}_s : \boldsymbol{\sigma} \quad (4.34)$$

$$\text{Ecrouissage intragranulaire} \quad \tau_{i_s} = \tau_0 e^{\frac{-RT}{Q_{0s}}} + \alpha \mu b \sqrt{\sum_{r \in S} A_{rs} \rho_r} \quad (4.35)$$

$$\text{Matrice d'interactions} \quad A_{rs} = h_{lat} + (1 - h_{lat}) \delta_{rs} \quad (4.36)$$

$$\text{Cinétique des dislocations} \quad \frac{d\rho_s}{d\gamma_s} = c_1 \sqrt{\rho_s} - c_2 \rho_s \quad (4.37)$$

Nous rappelons les principales notations utilisées :

- ▷ $\dot{\epsilon}^{\text{ld}_2}$, $\dot{\epsilon}^{\text{dif}}$ et $\dot{\epsilon}^{\text{dislo}}$ sont respectivement le fluage total du monocristal, le fluage associé à la diffusion de lacunes et le fluage par mouvements de dislocations ;
- ▷ C_d , Q_d et d sont respectivement le coefficient de diffusion aux joints de grains, l'énergie d'activation associée à la diffusion et la taille des grains ;
- ▷ \mathbf{m}_s , \mathbf{l}_s et \mathbf{n}_s sont respectivement le tenseur d'orientation, le vecteur unitaire de glissement et le vecteur normal au plan de glissement s ;

- ▷ $\dot{\gamma}_s^0$, Q_g , ρ_s sont respectivement le module de glissement, l'énergie d'activation associée à la montée et la densité de dislocations dans le système s ;
- ▷ τ_s , τ_0 , τ_{i_s} et Q_{0s} sont respectivement la contrainte de cisaillement, la cission critique initiale, la contrainte interne et l'énergie d'activation associée au glissement du système s ;
- ▷ A_{r_s} et h_{lat} sont respectivement le terme général et le paramètre caractéristique de la matrice d'érouissage intragranulaire ;
- ▷ c_1 et c_2 décrivent l'évolution des densités de dislocations.

Malgré la présence de simplifications, rendues nécessaires notamment par le manque de caractérisation précise des structures de dislocations dans l'UO₂ soumis à une sollicitation thermomécanique, ce modèle permet comme nous le verrons par la suite une représentation satisfaisante du comportement effectif du dioxyde d'uranium sur toute la gamme de sollicitations rencontrée pendant l'irradiation.

Identification des paramètres du modèle ld_2 De la même manière que pour la loi PC_U, l'identification a été réalisée en associant l'information expérimentale disponible et l'identification numérique. Une première identification du fluage stationnaire a été effectuée avec une méthode de Levenberg-Marquardt similaire à celle mise en œuvre au paragraphe 4.2.3 en prenant comme référence les résultats de simulations réalisées avec le modèle de fluage Gatt-Monerie⁶ [Monerie 06].

Comme illustré à la figure 4.19, les paramètres ont été identifiés sur des calculs de fluage en compression uniaxiale sur la gamme [10; 100]MPa × [1100; 1500]°C, qui recouvre l'essentiel des essais expérimentaux réalisés sur l'UO₂.

Par la suite des simulations d'essai d'érouissage ont été mises en œuvre pour l'identification des paramètres c_1 et c_2 , lesquels caractérisent le régime transitoire du comportement en fluage dislocations à travers l'équation (4.19). Les hauteurs de pic obtenues par la simulation montrent un bon accord (toujours en termes d'amplitude) avec les données expérimentales disponibles, comme illustré figure 4.20.

4.3.3.2 Réponse du polycristal

Le comportement effectif de l'agrégat en fluage est caractérisé par deux régimes comme attendu. La figure 4.19 présente la vitesse de fluage stationnaire pour différentes contraintes et températures lors d'essais de fluage en compression. Dans notre modèle, la dépendance à la température est directement reprise de la loi Gatt-Monerie et donc correctement estimée.

Bien qu'aucune fonction de couplage n'ait été mise en œuvre pour le basculement d'un mécanisme de fluage à l'autre (le taux de fluage total étant défini dans notre modèle comme la somme des contributions liées à la diffusion et aux mouvements de dislocations), la contrainte de transition est similaire à celle obtenue avec la loi Gatt-Monerie.

Pour une sollicitation de type essai de Déformation à Vitesse Constante (DVC), le comportement du VER est similaire à celui observé pour la loi PC_U. Sans surprise, les calculs réalisés sur le VER polycristallin en utilisant notre nouveau modèle mettent en évidence la même corrélation entre la contrainte effective dans l'agrégat et l'évolution de la densité de dislocations (décrite en détail au paragraphe 4.2.4), comme l'illustre la figure 4.20.

Pour reprendre la comparaison avec le modèle Gatt-Monerie, la loi d'évolution des densités de dislocations (équation 4.19) joue un rôle similaire à la fonction de couplage dynamique dans l'approche macroscopique. Il s'agit dans les deux cas d'un effet "retard" qui affecte l'activation du fluage dislocation. [Yust 69] propose une loi d'évolution des densités de dislocations en fonction de

6. Le fluage modélisé par la loi PC_U étant incompressible, la fraction volumique de pore utilisée dans le modèle Gatt-Monerie a été prise égale à 0.

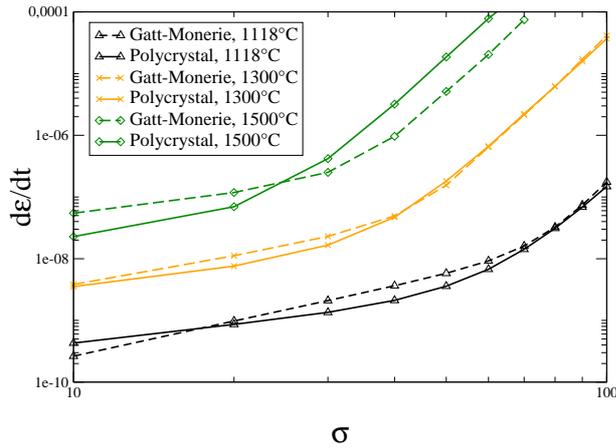


FIGURE 4.19 – Fluage stationnaire de l'UO₂ : comparaison entre la loi ld_2 et la loi Gatt-Monerie à différentes températures

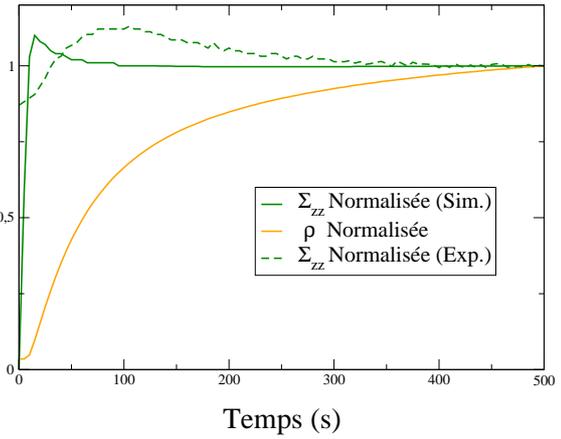


FIGURE 4.20 – Contrainte Σ_{zz} simulée et expérimentale, et densité de dislocations simulée au cours d'un essai d'écroutissage : grandeurs normalisées par leur valeur finale.

la déformation, obtenue à partir d'essais de compression uniaxiale ($\varepsilon \in [1; 5]$ %) réalisés sur des monocristaux sous la forme suivante :

$$\rho = 3.73e13\varepsilon^{0.39} \quad (4.38)$$

Les valeurs de densités de dislocations moyenne⁷ dans le VER, données au tableau 4.6, sont cohérentes avec celles obtenues à partir de l'équation (4.38) pour les niveaux de déformation considérés. Bien entendu, cette validation reste partielle dans la mesure où nous comparons des résultats obtenus sur des simulations polycristallines à une loi établie à partir d'essais sur des monocristaux.

Déformation axiale ε (%)	ρ (m ⁻²) VER	ρ (m ⁻²) : valeur issue de [Yust 69]
0	2.e10	2.e10
1.27	4.50e12	6.80e12

TABLE 4.6 – Densités de dislocations (données en m⁻²) en fonction du niveau de déformation : comparaison des résultats obtenus sur le VER polycristallin avec la loi (4.38) [Yust 69]

4.3.4 Modèles de fluage intragranulaire : bilan

Nous avons présenté au cours des paragraphes 4.2 et 4.3 deux modélisations de la déformation viscoplastique dans l'UO₂. Un certain nombre d'observations peut être tiré de ces développements.

4.3.4.1 Fluage thermique de l'UO₂

Les différents développements présentés dans les paragraphes précédents nous ont permis d'aboutir à un modèle de comportement intragranulaire à même de représenter le fluage ther-

7. Densité de dislocation totale, obtenue par addition des ρ_s associés à chaque système de glissement s , et moyennée sur le VER.

mique du combustible sur toute la gamme de sollicitations thermo-mécaniques rencontrée pendant l'irradiation.

En comparaison avec les modèles utilisés pour simuler le comportement de la pastille d' UO_2 , nous avons introduit des informations relatives à la microstructure du combustible dès que c'était possible, principalement à travers les systèmes de glissement de dislocations et les densités de dislocations, intégrées en tant que variables internes du modèle. En revanche, la description du fluage par diffusion de lacunes, qui ne prend en compte que la taille des grains (mais n'intègre pas d'information quant à leur morphologie) pourrait à l'avenir faire l'objet de nouveaux développements.

Paramètre	C_{11} (Pa)	C_{12} (Pa)	C_{44} (Pa)	C_d	Q_d (J)	$\dot{\gamma}_s^0$ (s^{-1})
Valeur	3.96e11	1.21e11	0.64e11	7.3e-24	2.08e5	1.64e-2
Source	[Wolfe 67]	[Wolfe 67]	[Wolfe 67]	*	*	*
Paramètre	Q_g (J)	m	h_{lat}	c_1	c_2	τ_{01} (Pa)
Valeur	4.62e5	8	0.14	2.e9	2.e3	2.48e6
Source	[Monerie 06]	[Monerie 06]	*	*	*	[Alamo 78]
Paramètre	Q_{01} (J)	τ_{02} (Pa)	Q_{02} (J)	α	b (m)	ρ_0 (m^{-2})
Valeur	-2.26071e4	8.03136e6	-1.77571e4	1.48	2.735e-10	2.e10
Source	[Alamo 78]	[Alamo 78]	[Alamo 78]	[Sauter 01]	[Sauter 01]	[Yust 69]

TABLE 4.7 – Paramètres du modèle de fluage ld_2

Le tableau 4.7 présente les valeurs numériques des paramètres de la loi ld_2 . Ce modèle a été établi pour reproduire le fluage thermique stationnaire du combustible. Les effets transitoires tels que le pic de compression apparaissent à travers l'évolution de la densité de dislocation, introduite comme variable interne du modèle.

D'autres mécanismes de déformation du combustible irradié ont été décrits au chapitre 2. La modélisation de l'endommagement intergranulaire à l'échelle du polycristal fera l'objet du paragraphe 4.4. L'extension du modèle aux mécanismes de fluage sous irradiation va maintenant être discutée.

4.3.4.2 Vers la prise en compte du fluage irradiation

Comme nous l'avons décrit au chapitre 2, l'effet de l'irradiation sur le comportement du combustible se manifeste de deux manières :

- le fluage d'irradiation proprement dit ;
- l'effet coopératif d'accélération du fluage thermique.

Les mécanismes proposés pour le fluage d'irradiation sont directement associés à des réorganisations de la matière au voisinage des pointes de fissions. Ces mécanismes ne sont pas suffisamment bien connus pour aller au-delà de l'approche semi-empirique présentée au chapitre 2.

En ce qui concerne l'effet d'accélération du fluage, il serait possible de le prendre en compte en intégrant l'effet de l'irradiation sur la génération de boucles de dislocations. [Noirot 06] propose notamment une loi d'évolution de la densité de dislocations ρ en fonction du taux de fissions \dot{F} sous la forme :

$$\dot{\rho} = \rho \left[\alpha \frac{E_{fis}}{\mu} \dot{F} - \frac{1}{\tilde{t} \left(1 + e^{-\frac{T-T_r}{\Delta T_r}} \right)} \right] \quad (4.39)$$

avec :

- ▷ ρ la densité de dislocations dans le grain ;
- ▷ \dot{F} le taux de fissions, soit le nombre de fissions par seconde et par m^3 de combustible ;
- ▷ E_{fis} l'énergie de fission ;
- ▷ T , T_r et ΔT_r respectivement la température absolue, la température de recuit des dislocations et une constante homogène à une température ;
- ▷ α une constante du modèle ;

En combinant l'équation (4.39) avec l'équation de cinétique des densités de dislocations (4.37) du modèle ld_2 , il serait possible de générer l'effet d'accélération du fluage observé expérimentalement. Signalons malgré tout que ces observations ont été réalisées dans des gammes de sollicitations pour lesquelles le fluage se produit préférentiellement par diffusion de lacunes, et qu'il n'y a pas de preuve expérimentalement de l'accélération du fluage-dislocations sous irradiation.

Ces éléments sont présentés à titre de perspective, et n'ont pu être développés faute de temps dans le cadre de cette thèse. Nous reviendrons au chapitre 9 sur la prise en compte de ces mécanismes de déformations à l'échelle de l'agrégat.

D'un point de vue purement thermo-mécanique, nous devons encore nous pencher sur le cas des joints de grains, et sur la manière dont l'endommagement intergranulaire participe à la déformation du polycristal.

4.4 Glissement et décohésion intergranulaire

Les paragraphes précédents ont permis de décrire le fluage intragranulaire du combustible sur la gamme de sollicitations rencontrée pendant l'irradiation. A l'échelle du polycristal, il reste encore à prendre en compte le comportement des joints de grains, dont le rôle est important à la fois du point de vue de la diffusion des produits de fission et du point de vue thermomécanique. C'est sur ce deuxième aspect que nous allons à présent nous pencher. Le rappel de certains des éléments de bibliographie présentés au chapitre 2.2 nourrit une réflexion sur la modélisation du comportement des joints de grains à l'échelle du polycristal.

Par la suite, les développements présentés se concentrent sur les phénomènes de décohésions observés expérimentalement par [Dherbey 00]. La modélisation proposée, basée sur l'utilisation de zones cohésives, s'inspire des travaux de [Vincent 07] pour la modélisation de la décohésion intergranulaire de l' UO_2 dans le cas 2D. Nous nous proposons de compléter ce modèle et de l'étendre à l'étude de l'agrégat 3D périodique.

4.4.1 Les joints de grains dans l' UO_2

Un des principaux atouts de la modélisation polycristalline est la possibilité de décrire finement le comportement des joints de grains. Ce point est encore plus capital dans le cas de l' UO_2 pour lequel les joints jouent un rôle décisif à la fois du point de vue mécanique et du point de vue de la diffusion des produits de fissions, comme nous le verrons dans les paragraphes suivants.

4.4.1.1 Morphologie des joints de grains

La modélisation des joints de grains nécessite a minima de proposer une description précise de leur constitution, ce qui, comme nous allons le voir, est loin d'être évident.

Du fait de leurs dimensions caractéristiques (l'épaisseur moyenne d'un joint de grain dans un polycristal d' UO_2 étant de l'ordre du nanomètre [Noirot 05]), il est difficile de les considérer comme un milieu continu à part entière. Par ailleurs, lorsque le polycristal est soumis à une sollicitation mécanique, la structure du joint peut évoluer par des processus de nucléation de cavités pilotés par différents mécanismes tels que la condensation de lacunes ou l'empilement de dislocations, comme illustré figure 4.21 [Kassner 03].

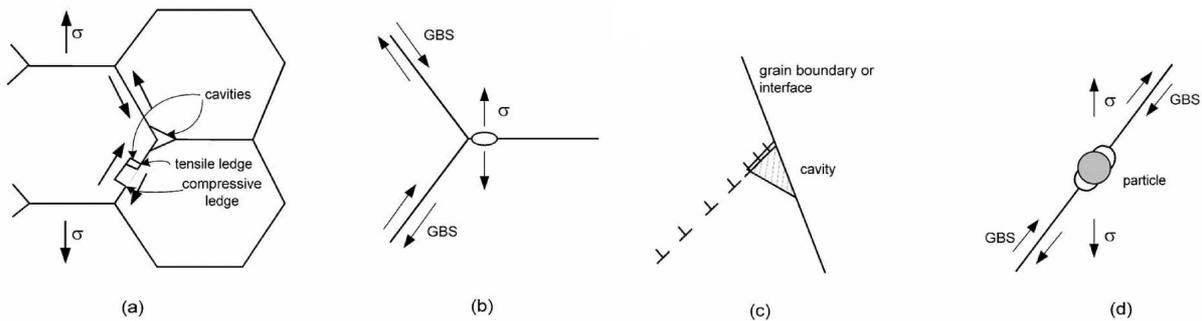


FIGURE 4.21 – Mécanismes de nucléation de cavités : glissement au joint triple (a.), condensation de lacunes (b.) mécanisme de Zener-Stroh (c.), nucléation autour d'un défaut ponctuel (d.) [Kassner 03]

Dans le cas du combustible, cette problématique est d'autant plus complexe que la structure du joint de grain est affectée par l'irradiation, comme cela a déjà été brièvement mentionné au paragraphe 2.4.2. Du fait de l'apparition de produits de fissions dans le matériau, un mécanisme complexe d'échanges de matière s'établit entre l'intérieur du grain et les cavités situées à l'interface entre les grains, jusqu'à la restructuration complète de celui-ci [White 04].

Sans décrire plus en détail ces phénomènes, cette brève introduction permet de prendre la mesure du défi présenté par la modélisation des joints de grains dans l' UO_2 . Une revue des différentes approches de modélisation des joints de grains est proposée dans [Diard 01], selon que les joints sont modélisés comme un milieu (volumique) ou comme une interface (surfactive).

4.4.1.2 Rôle mécanique des joints de grains

Du point de vue de la mécanique, les joints de grains sont des acteurs de la déformation en fluage du polycristal selon des mécanismes décrits au paragraphe 2.2 et qui peuvent être répartis en deux catégories :

- le fluage par glissement accommodé par la diffusion ;
- la décohésion intergranulaire par cavitation ou fissuration.

La principale différence entre ces deux types de mécanismes réside dans la (non) apparition de cavités au niveau du joint de grain selon que le glissement est accommodé ou non, auquel cas la déformation participe à l'endommagement du matériau, puis à sa ruine. Par la suite nous nous intéresserons plus particulièrement aux phénomènes de décohésion, pour lesquels nous disposons d'observations expérimentales présentées au paragraphe 4.4.1.3.

[Dherbey 00] propose une caractérisation des joints de grains, représentés schématiquement par des zones planes de longueur λ séparées par des marches de largeur b (voir figure 4.22).

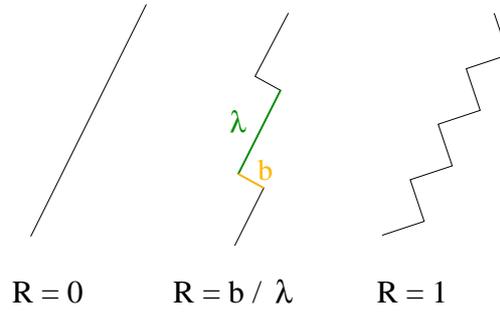


FIGURE 4.22 – Schéma de la rugosité d'un joint de grain [Dherbey 00]

Le paramètre de rugosité $R = \frac{b}{\lambda}$ définit la proportion de déformation accommodée ε_{gbs}^A selon l'équation (4.40) :

$$\dot{\varepsilon}^{gbs} = R\dot{\varepsilon}_{gbs}^A + (1 - R)\dot{\varepsilon}_{gbs}^{NA} \quad (4.40)$$

avec $\dot{\varepsilon}_{gbs}$ le taux de déformation total dû au glissement aux joints de grains et $\dot{\varepsilon}_{gbs}^{NA}$ le taux de déformation associé à la décohésion.

4.4.1.3 Mise en évidence expérimentale de la décohésion

Des essais expérimentaux (voir [Dherbey 00]) menés sur des pastilles combustible ont permis de mettre en évidence l'apparition de décohésion intergranulaire dans l' UO_2 vierge dans la gamme de sollicitations thermo-mécanique caractéristique d'une irradiation en rampe de puissance.

La figure 4.23 permet de mettre en évidence la fissuration de la pastille au niveau des joints de grains. Ce type de résultats a été observé lors d'essais de fluage en compression uniaxiale à $1465^\circ C$ pour différentes tailles de grains (typiquement $d \in [10; 40] \mu$) et pour différentes valeurs de contraintes imposées ($\sigma \in [20; 60]$ MPa). Deux mécanismes semblent être mis en jeu selon le niveau de contrainte :

- des phénomènes de cavitations à “basse” contrainte ($\sigma \sim 30$ MPa) ;
- la fissuration des joints pour des niveaux de contraintes plus importants ($\sigma > 40$ MPa).

L'échantillon étant soumis à une sollicitation effective de compression pure, un approche macroscopique ne peut rendre compte des phénomènes de traction localisés aux joints de grains qui sont à l'origine de la décohésion. Seule une description du combustible à l'échelle polycristalline permet de tenir compte de l'incompatibilité de déformation intergranulaire et de reproduire les observations expérimentales.

La part de la décohésion intergranulaire lors de ces essais est comprise entre 25% (pour $\sigma = 40$ MPa) et 55% (pour $\sigma = 60$ MPa) de la déformation totale du combustible. Nous allons maintenant nous intéresser à la modélisation de ces phénomènes dans le cas d'un VER polycristallin modélisé par éléments finis.

4.4.2 Modèles de zones cohésives

Dans le cadre de la méthode des éléments finis, les zones cohésives ont démontré leur capacité à modéliser des phénomènes complexes d'interface tels que ceux observés aux joints de grains. Nous allons à présent décrire ce type de modèle avant de travailler à leur intégration dans le VER polycristallin d' UO_2 .

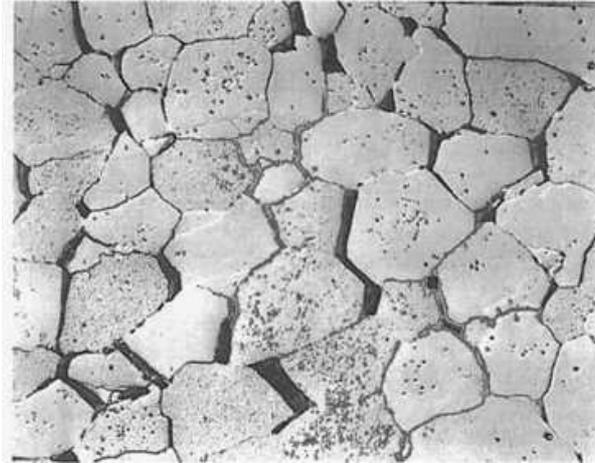


FIGURE 4.23 – Mise en évidence de phénomènes de décohésion intergranulaire lors d’un essai de fluage en compression uniaxiale sous 50 MPa à 1465°C [Dherbey 00]

4.4.2.1 Éléments cohésifs

Les modèles de zones cohésives se proposent de décrire les phénomènes de décohésion par la modélisation de surfaces (lignes dans le cas 2D) de discontinuités potentielles. Le long de telles surfaces, des points, initialement confondus, peuvent se séparer. Si un tel décollement apparaît, deux surfaces sont créées. Étant donnée une normale à la surface initiale, il est possible de parler de lèvres inférieure et supérieure, ce qui est illustré en figure 4.24.

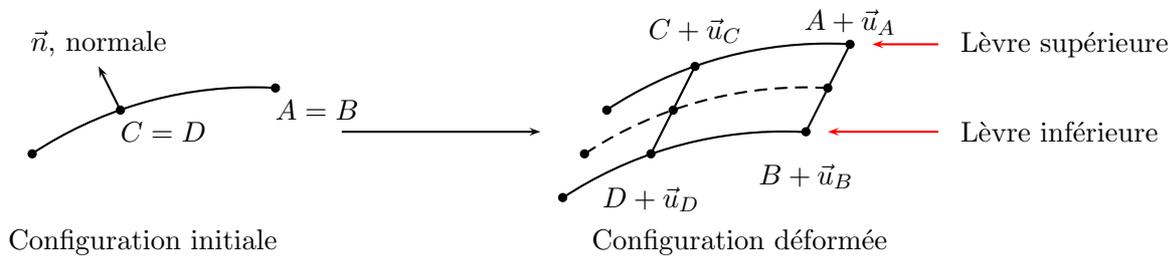


FIGURE 4.24 – surface de discontinuités

Le comportement de la zone cohésive est défini par une relation évolutive $\mathbf{T}(\mathbf{u})$ entre les efforts de traction et le saut de déplacement à l’interface. Soit \mathbf{n} la normale à l’interface, alors la loi de comportement de la zone cohésive peut se mettre sous la forme suivante :

$$\mathbf{T} = f(\mathbf{u}) = f(u_n \mathbf{n} + \mathbf{u}_t) \quad \text{avec } \mathbf{u}_t \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (4.41)$$

Cette équation traduit la capacité de l’interface à transmettre les contraintes. Elle permet de prendre en compte non seulement la décohésion (à travers le saut de déplacement normal u_n) mais aussi le comportement tangentiel associé au glissement \mathbf{u}_t . Par analogie, le comportement d’une zone cohésive peut être analysé comme celui d’une interface endommageable dont la capacité à transmettre des contraintes est pilotée par sa loi de comportement (4.41).

Ce type de modèle a été développé initialement pour la prise en compte de phénomènes surfaciques complexes (adhésion / décohésion, frottement) dans les composites et les bétons. Des travaux ultérieurs ont démontré leur intérêt dans le cadre de la mécanique de la rupture (voir notamment [Monerie 00] et [Helfer 06]), et, comme nous le verrons plus tard, une première application

a été proposée pour la modélisation de la décohésion intergranulaire dans l'UO₂.

4.4.2.2 Loi de comportement

L'équation (4.41) décrit la forme générale de la loi de comportement d'une zone cohésive. Dans le cas d'une zone cohésive à l'interface entre deux mailles volumiques Ω_1 et Ω_2 (voir figure 4.25), celle-ci relie le vecteur contrainte de la maille (c'est-à-dire la force surfacique $\mathbf{F} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}$) au saut de déplacement entre les deux mailles.

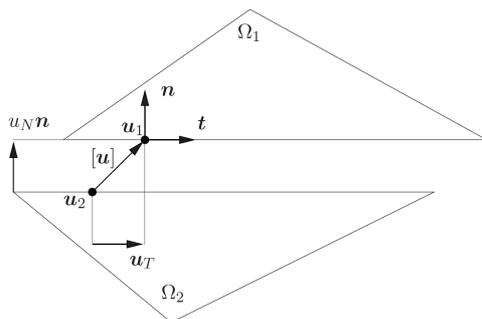


FIGURE 4.25 – Zone cohésive à l'interface entre deux mailles volumiques [Vincent 07]

Quelle que soit sa forme, la loi de décohésion $\mathbf{T}(\mathbf{u})$ est caractérisée par une énergie surfacique de fissuration (l'aire sous la courbe correspondant à l'énergie élastique restituée par unité de surface). D'autres paramètres sont fréquemment mis en jeu par les modèles de zones cohésives :

- la raideur (élastique) initiale, qui correspond à la raideur de la zone cohésive non endommagée. Elle est le plus souvent prise infinie⁸ ;
- sa contrainte maximale, à partir de laquelle la zone cohésive commence à s'endommager ;
- le saut de déplacement maximal. Lorsque celui-ci est atteint, la zone cohésive est incapable de transférer des contraintes. Elle peut toutefois transférer des contraintes de compression si le jeu entre les deux lèvres de la zone est complètement refermé. Ceci respecte le caractère unilatéral d'une fissure.

4.4.3 Implémentation dans le modèle d'agrégat

Il nous faut maintenant intégrer ces éléments cohésifs dans notre VER polycristallin. Ce paragraphe décrit brièvement les difficultés rencontrées en termes de maillage au cours de cette démarche, et présente la loi de décohésion retenue pour l'ouverture aux joints de grains.

4.4.3.1 Zones cohésives et éléments finis

L'introduction de zones cohésives dans notre modèle d'agrégat a été faite par l'intermédiaire d'éléments surfaciques spécifiques appelés éléments cohésifs, placés à l'interface entre les mailles volumiques du maillage comme représenté à la figure 4.25. L'un des inconvénients les plus fréquemment mentionnés concernant cette approche est que le trajet de fissuration - fissure qui peut se produire uniquement le long des éléments cohésifs - dépend du maillage éléments finis.

8. Dans la pratique, l'introduction d'éléments cohésifs modifie la rigidité de la structure avant même le début de l'endommagement. Cette perturbation est d'autant plus importante que le maillage est fin. Pour cette raison, le choix est souvent fait de prendre une raideur la plus grande possible pour les éléments cohésifs, de façon à limiter leur impact ; malgré tout ceci peut conduire à des difficultés numériques supplémentaires.

Dans le cas de la fissuration intergranulaire, la problématique est malgré tout différente puisque le trajet de la décohésion est à priori connu. Une fois postulée la forme des grains, l'introduction de zones cohésives à l'interface intergranulaire n'implique pas d'approximation supplémentaire.

Les éléments cohésifs disponibles dans CAST3M sont limités à l'utilisation de fonctions d'interpolation linéaires. Tous les calculs présentés par la suite dans le cadre de la simulation de la décohésion aux joints de grains seront donc réalisés avec des éléments linéaires, y compris en ce qui concerne les éléments volumiques (tétraèdres à 4 noeuds). Comme nous le verrons au chapitre 6, ceci ne va pas sans poser de problème dans le cas d'une loi de fluage incompressible telle que celle présentée au chapitre précédent.

4.4.3.2 Gestion des conditions de périodicité

Une des difficultés liées à la mise en œuvre d'éléments cohésifs dans le cadre d'un modèle d'agrégat périodique concerne les joints de grains situés sur l'enveloppe du VER.

Le premier problème est lié à la génération du maillage d'éléments cohésifs proprement dite. En effet, si l'on considère deux joints de grains (S_1 , S_2) reliés par périodicités tels que $S_1 + \Delta x = S_2$, il est nécessaire de générer une nouvelle surface $S_1^* = S_1 + \Delta x$ de façon à pouvoir introduire les zones cohésives entre S_1^* et S_2 plutôt qu'entre S_1 et S_2 directement, comme illustré à la figure 4.26.

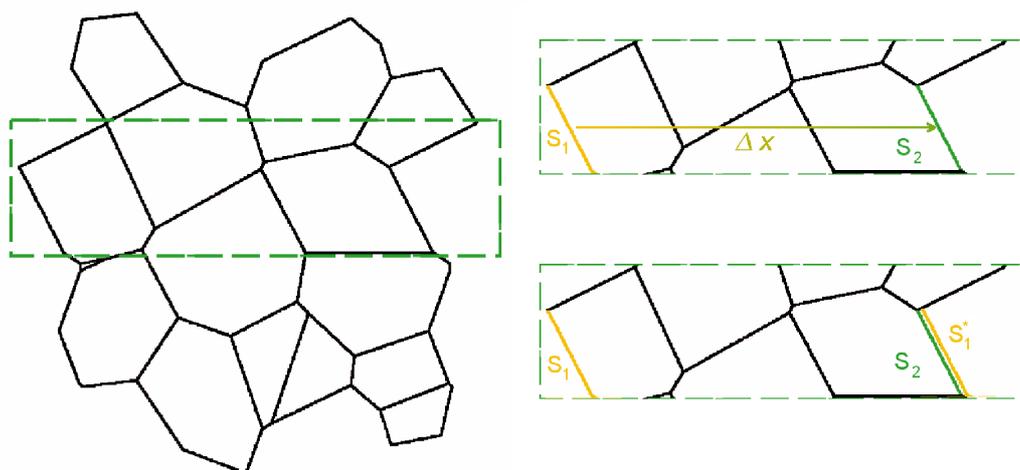


FIGURE 4.26 – Génération d'éléments cohésifs sur l'enveloppe du VER : translation d'un joint de grain et repérage des deux surfaces en vis-à-vis

A ce stade, il reste encore à formuler les conditions de périodicité entre S_1 et S_1^* . Le cas des joints triples (intersection entre trois grains) situés sur l'enveloppe pose problème puisque l'introduction d'éléments cohésifs implique de dédoubler des noeuds qui par la suite correspondront aux deux lèvres de la fissure.

Un soin particulier est nécessaire afin d'associer les bons couples de noeuds lors de l'écriture des conditions de périodicité. Cette difficulté a été traitée en procédant joint de grain par joint de grain à la fois pour la génération des éléments cohésifs et pour la gestion de la périodicité.

4.4.3.3 Zones cohésives et décohésion intergranulaire

L'utilisation de zones cohésives pour la modélisation de la décohésion aux joints de grains dans l' UO_2 a déjà été mise en œuvre par [Vincent 07]. En termes de loi de comportement, c'est bien entendu sur ces travaux que nous nous sommes basés. Toutefois, quelques ajustements ont dû être

réalisés comme nous le verrons par la suite, en particulier pour la prise en compte du glissement aux joints de grains.

Le modèle de décohésion utilisé est basé sur les travaux de [Perales 05], [Vincent 07] et peut s'écrire sous la forme (4.42) :

$$\sigma_n = \beta K_n u_n \quad (4.42)$$

avec :

- ▷ σ_n La contrainte en traction subie par l'élément cohésif ;
- ▷ K_n la raideur linéique (en Pa.m^{-1}) de l'élément ;
- ▷ β le paramètre d'endommagement ($\beta \in [0; 1]$) ;
- ▷ u_n le saut de déplacement normal à l'interface.

Le paramètre d'endommagement décrit trois phases successives selon que l'interface soit saine ($\beta = 1$), partiellement endommagée ($\beta \in [0; 1]$) ou complètement rompue ($\beta = 0$). L'évolution de l'endommagement est pilotée par l'équation (4.43) :

$$\beta = \begin{cases} 1 & \text{si } u_n^* < \delta_c \\ \frac{\delta - u_n^*}{\delta_c + u_n^*} & \text{si } \delta_c \leq u_n^* \leq \delta \\ 0 & \text{si } u_n^* > \delta \end{cases} \quad \text{avec } \begin{cases} \delta_c = \sqrt{\frac{2w^{ref}}{(9-4\ln 4)K_n}} \\ \delta = 3\delta_c \end{cases} \quad (4.43)$$

où w^{ref} représente l'énergie surfacique dissipée, δ_c le seuil d'endommagement en ouverture, δ le seuil de décohésion en ouverture et $u_n^* = \max_t u_n(t)$ l'ouverture maximale subie par la zone cohésive. Le comportement en traction du modèle de décohésion est illustré à la figure 4.27.

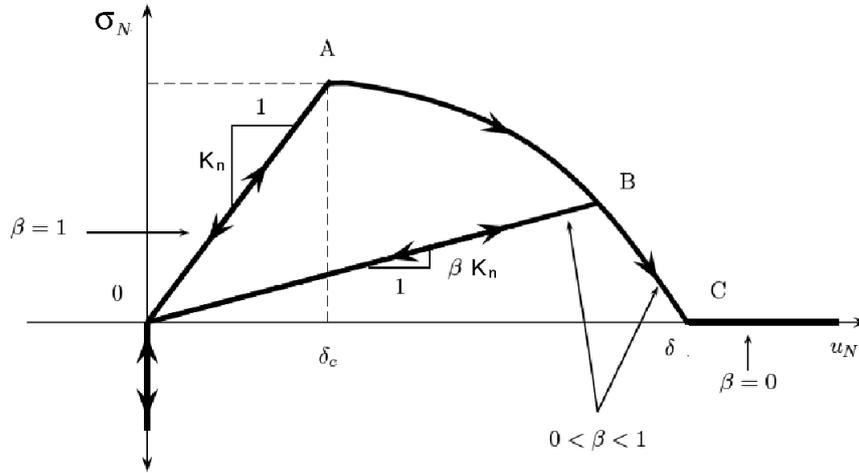


FIGURE 4.27 – Loi cohésive normale : contrainte normale en fonction du saut de déplacement dans le cas d'une sollicitation de charge-décharge en traction normale [Vincent 07].

La modélisation de la décohésion intergranulaire proposée dans [Vincent 07] ne prend pas en compte le comportement tangentiel des joints de grains et des phénomènes de glissement qui y sont associés.

Afin de modéliser ces phénomènes, une approche de type Mohr-Coulomb pour le contact avec frottement a été retenue, comme illustré à la figure 4.28. La condition de glissement peut s'écrire :

$$|\tau| + \sigma_n \tan \phi - c(\beta) \leq 0 \quad (4.44)$$

où

- ▷ $c(\beta)$ est la cohésion ;
- ▷ ϕ est l'angle au sommet du cône de frottement ;
- ▷ τ et σ_n sont les contraintes tangentielles et normales perçues par l'élément.

La cohésion tangentielle de la zone cohésive tient elle aussi compte de l'endommagement. Par la suite nous supposons que $c = \beta K_n \max(u_n^*, \delta_c)$, ce qui revient à associer les comportements en traction et en cisaillement du joint de grain.

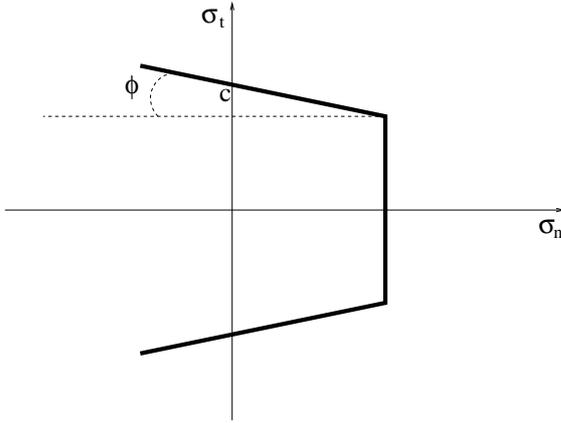


FIGURE 4.28 – Critère de Mohr-Coulomb pour le comportement tangentiel des zones cohésives

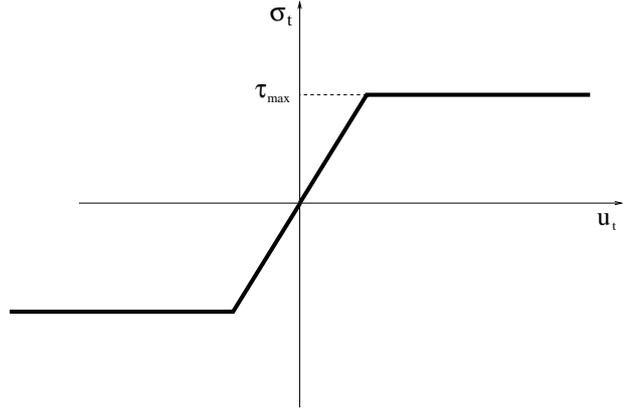


FIGURE 4.29 – Comportement élasto-plastique parfait en glissement des joints de grains

A contrainte normale et niveau d'endommagement donnés, le comportement tangentiel $\tau = f(\mathbf{u}_t)$ de la zone cohésive est élasto-plastique parfait. En supposant égales les raideurs initiales en traction et en cisaillement, nous pouvons décrire pour chaque direction j :

$$\tau^j = \begin{cases} K_n u_t^j & \text{si } |u_t^j| \leq u^* \\ \text{sgn}(u^*) \tau^{max} & \text{si } |u_t^j| > u^* \end{cases} \quad \text{avec } \tau^{max} = c - \sigma_N \tan \phi \quad (4.45)$$

avec :

- ▷ τ^j la composante j du vecteur de contraintes tangentielles ;
- ▷ u_t^j la composante j du saut de déplacement tangentiel à l'interface ;
- ▷ $u^* = \frac{\tau^{max}}{K_n}$ le seuil de plasticité en déplacement tangentiel.

Nous verrons au chapitre 8 la manière dont ce modèle nous permet de simuler la décohésion intergranulaire observée expérimentalement au cours d'essais de fluage.

Remarquons déjà que ce modèle ne prend pas en compte l'endommagement différé des joints de grains par nucléation de cavités présenté à la figure 4.21 : il s'agit d'un modèle de fissuration instantanée, pour lequel la zone cohésive ne perd de sa rigidité qu'après l'amorçage de la fissure. Notons encore que ce modèle, paramétré par un seuil de décohésion en contrainte, ne peut pas non plus rendre compte des effets d'endommagements associé à la vitesse de chargement. Ces différentes limitations et leurs conséquences sur les résultats de simulations seront abordées plus en détail au chapitre 8.

4.5 Conclusions sur les mécanismes de déformation du polycristal

Les différents modèles présentés dans ce chapitre s'appuient sur notre connaissance expérimentale du combustible à l'échelle polycristalline pour décrire le comportement de l'agrégat

sur l'ensemble de la gamme de sollicitations rencontrée lors d'une irradiation en rampe de puissance.

Plusieurs étapes ont été nécessaires pour la construction d'un modèle satisfaisant pour le fluage thermique de l' UO_2 à l'échelle du monocristal. L'approche adoptée reste en partie phénoménologique et s'avère un compromis entre l'information microstructurale disponible et l'impératif de cohérence avec les modèles usuels développés à l'échelle de la pastille. Le manque d'éléments de caractérisation expérimentales des structures de dislocations dans l' UO_2 et de leur rôle dans la déformation viscoplastique du combustible a imposé l'introduction d'hypothèses simplificatrices, principalement en termes de systèmes de glissements activés et d'interactions entre les dislocations de ces différents systèmes.

Le fluage d'irradiation n'a pas été pris en compte dans le cadre de ce modèle polycristallin, bien que quelques perspectives ait été présentées dans ce sens. Les conséquences de cette simplification seront abordées au chapitre 9.

La modélisation du glissement intergranulaire se pose comme un premier jalon dans la description des joints de grains. Le modèle retenu représente un mécanisme de fissuration instantané, qui ne pourra rendre compte des phénomènes d'endommagement différé par cavitation observés pour l' UO_2 dans le domaine des basses contraintes. L'approche présentée dans le cadre de cette thèse permet toutefois une première observation de la décohésion en relation avec les mesures expérimentales, comme nous le verrons au chapitre 8.

Troisième partie

Sensibilité numérique et représentativité du VER

Chapitre 5

Première analyse du comportement local du VER

Les développements présentés dans les chapitres précédents ont permis d'aboutir à la mise en place d'un modèle d'agrégat polycristallin pour le dioxyde d'uranium. Les résultats qui ont été présentés jusqu'ici constituent une première étape de validation sur le comportement effectif du Volume Élémentaire Représentatif. Le véritable apport de l'approche micromécanique réside dans l'information locale rendue disponible : les effets de concentrations de contraintes issus de l'anisotropie du comportement intragranulaire (désignés par la suite sous le terme d'incompatibilité intergranulaire), le comportement des joints de grains sont autant d'éléments jusque là inaccessibles au travers d'une vision "macroscopique" du comportement de l' UO_2 .

Ce chapitre a pour vocation de délivrer une première illustration de ces phénomènes dans le cas d'un agrégat soumis à une sollicitation de compression uniaxiale pure. Plusieurs grandeurs caractéristiques de l'état local du polycristal sont définies à cette occasion, en explicitant leur impact sur le comportement des gaz de fission.

Sommaire

5.1	Présentation de la simulation	120
5.1.1	Conditions du calcul	120
5.1.2	Origine des phénomènes de localisation	121
5.1.3	Réponse effective de l'agrégat	122
5.2	Analyse des distributions de contraintes locales	123
5.2.1	Localisation de la contrainte intragranulaire	123
5.2.2	Contraintes aux joints de grains	125
5.3	Conclusions de l'analyse du comportement local du VER	128
5.3.1	Revue des résultats obtenus	128
5.3.2	Problèmes de sensibilité et choix du VER	129

Ce chapitre s’appuie sur la simulation d’un essai de Déformation à Vitesse Constante (DVC) sur un polycristal de dioxyde d’uranium. Les différents paragraphes s’articulent autour des grandes étapes de la simulation :

- le paragraphe 5.1 présente les principaux éléments de pre-processing du calcul, depuis l’écriture des conditions aux limites jusqu’au choix du VER polycristallin ;
- le paragraphe 5.2 concerne le dépouillement des résultats et plus particulièrement la caractérisation des distributions de contraintes locales.

Ces résultats sont repris au paragraphe 5.3 sous forme de bilan. Cette dernière partie est l’occasion de souligner les limites de validité de cette première simulation, notamment en termes de stabilité numérique du calcul, question qui sera traitée plus en détail au chapitre 6.

5.1 Présentation de la simulation

5.1.1 Conditions du calcul

Les résultats présentés dans ce chapitre concernent la simulation d’un essai de compression uniaxiale à vitesse imposée similaire à ceux présentés au paragraphe 4.2. Avant de se pencher plus en détail sur l’analyse des phénomènes de localisation dans l’agrégat ce premier paragraphe s’applique à décrire les grandes lignes du calcul, en particulier en termes de choix du chargement et de caractéristiques du VER retenu.

5.1.1.1 Données du chargement thermo-mécanique

Pour simuler un essai DVC en compression, un taux de déformation macroscopique constant \dot{E}_{zz} est imposé dans la direction (\mathbf{O}_z) et toutes les composantes de la contrainte macroscopique sont imposées nulles à l’exception de Σ_{zz} . Dans le cadre de l’homogénéisation périodique, cette condition de déformation libre a été introduite par le biais de noeuds “fantômes”, comme décrit en annexe C.

Les données du chargement sont inspirées d’essais DVC expérimentaux, et les valeurs numériques sont données au tableau 5.1.

	Durée de l’essai (s)	Vitesse de déformation (s^{-1})	Temperature ($^{\circ}C$)
Valeur	500	2.452e-5	1450

TABLE 5.1 – Paramètres du chargement thermo-mécanique

Les niveaux de déformation axiale E_{zz}^{max} atteints au cours d’essais expérimentaux, typiquement de l’ordre de 5-6%, sont bien supérieurs à celui du chargement défini au tableau 5.1 (pour lequel $E_{zz}^{max} \simeq 1.2\%$). Malgré tout, la durée de la simulation est suffisante pour atteindre le régime stationnaire qui suit le pic de contrainte, comme nous le verrons par la suite.

5.1.1.2 Choix du Volume Elementaire Représentatif

Le calcul a été effectué sur un agrégat 3D-périodique à 100 grains. L’orientation des grains a été tirée avec une densité de probabilité uniforme, comme expliqué en annexe B. Le maillage du Volume Élémentaire Représentatif est présenté à la figure 5.1.

Les grains sont maillés avec en moyenne 195 tétraèdres quadratiques, soit environ 1000 points d’intégration par grain. A titre de comparaison, [Barbe 01] propose une moyenne de 661 points

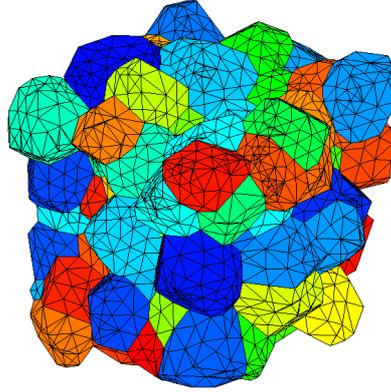


FIGURE 5.1 – Maillage de l'agrégat à 100 grains utilisé pour la simulation

de Gauss par grain pour l'intégration d'une loi de plasticité cristalline similaire à celle utilisée ici. Une fois encore, la question de la convergence numérique des résultats par rapport à la finesse du maillage sera abordée au chapitre 6 et les résultats présentés dans les paragraphes suivants ne seront pas analysés de ce point de vue.

5.1.2 Origine des phénomènes de localisation

Etant donnée la gamme de sollicitations, le mécanisme de fluage par mouvements de dislocations sera prépondérant vis-à-vis du fluage par diffusion de lacunes. Ceci signifie en particulier que les phénomènes d'incompatibilité intergranulaire seront associés à l'orientation cristalline respective des grains et non pas à leur taille, laquelle intervient dans le cas du fluage-diffusion.

Rappelons en effet que la loi d'écoulement associé à chaque système de glissement se met sous la forme suivante :

$$\dot{\gamma}_s = \dot{\gamma}_s^0 e^{\frac{-Q_g}{RT}} \rho_s \left(\frac{|\tau_s|}{\tau_{i_s}} \right)^m \text{sgn}(\tau_s) \quad (5.1)$$

L'activité d'un système dans un grain donné (caractérisé par les trois angles d'Euler (ϕ_1, Φ, ϕ_2) qui définissent ses orientations cristallines) est pilotée par la cission résolue τ_s qu'il perçoit. Pour une sollicitation uniaxiale telle que celle étudiée dans ce chapitre, nous rappelons la définition du facteur de Schmid m_s associé au système s :

$$m_s(\phi_1, \Phi, \phi_2) = \frac{\tau_s}{\Sigma} \quad (5.2)$$

où Σ est la contrainte effective perçue par le matériau. Plus ce rapport est élevé, plus l'activation du système sera favorisée. La déformation viscoplastique de chaque grain du polycristal dépend donc de son orientation, ce qui génère une première hétérogénéité au sein du VER.

Cette hétérogénéité va augmenter au cours de la simulation sous l'effet de la multiplication des dislocations. Comme nous l'avons vu au chapitre 4, l'équation de cinétique des densités de dislocations (4.37) implique une augmentation de la densité de dislocations pour les systèmes actifs jusqu'à saturation. Du fait de la présence du terme ρ_s dans l'équation (5.1), le taux de cisaillement va aussi augmenter pour les systèmes actifs.

L'analyse des résultats de la simulation sera l'occasion de revenir sur ces phénomènes, comme nous allons maintenant le voir.

5.1.3 Réponse effective de l'agrégat

5.1.3.1 Evolution de la réponse macroscopique au cours du temps

Le paragraphe 4.2 a été l'occasion de longuement décrire la réponse de la loi ld_2 à une sollicitation de type déformation à vitesse imposée constante. Comme l'illustre la figure 5.2, la courbe réponse $\Sigma = f(t)$ du VER présente un pic de contrainte suivi d'un adoucissement. Ce dernier est associé à une augmentation brutale des densités de dislocations dont l'évolution est présentée figure 5.3.

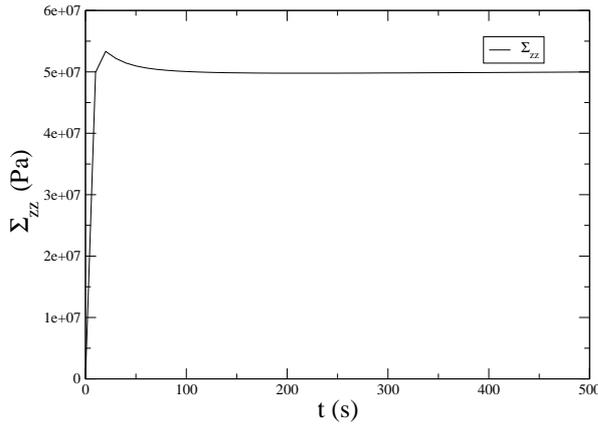


FIGURE 5.2 – Evolution de la contrainte effective Σ_{zz} au cours du temps

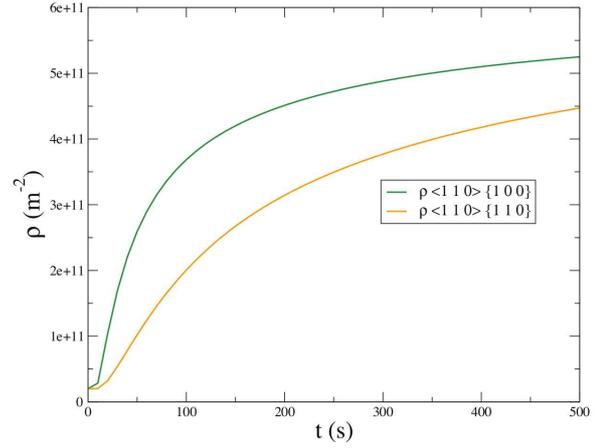


FIGURE 5.3 – Evolution des densités de dislocations moyennes sur l'agrégat des différents systèmes au cours du temps

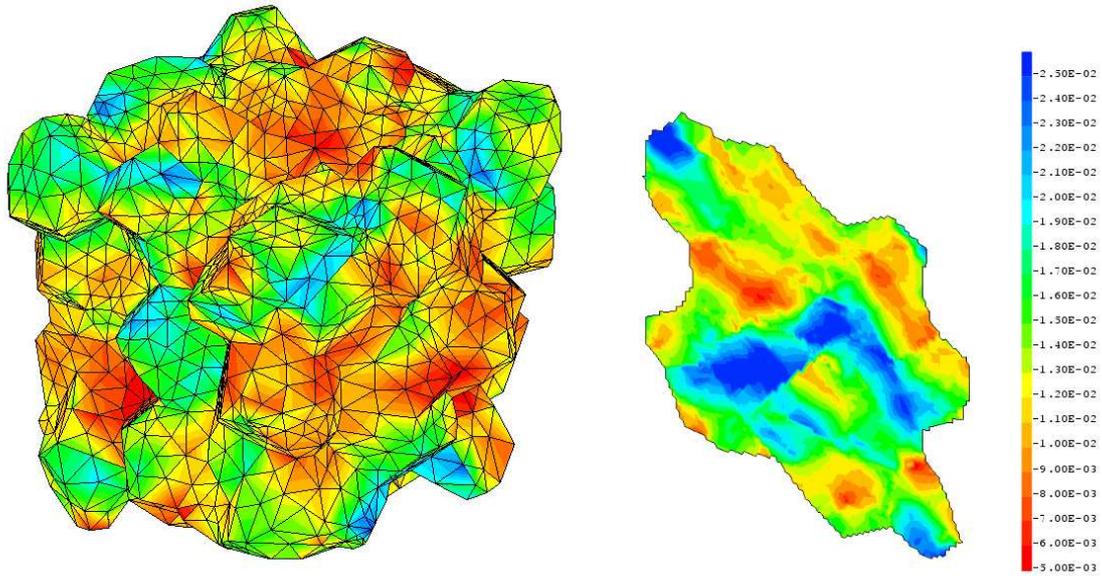
L'évolution temporelle de la réponse macroscopique du polycristal met en évidence l'apparition d'un régime stationnaire à la fin du calcul. Les figures 5.2 et 5.3 montrent respectivement que la contrainte effective est stabilisée et que les densités de dislocations sont proches de la saturation. D'après les éléments présentés au paragraphe précédent, nous pouvons conclure que l'hétérogénéité des distributions de contraintes qui seront observées par la suite est représentative des phénomènes de localisations observables pour cet agrégat.

Il est par ailleurs intéressant de noter que, d'après la figure 5.3, l'activité des systèmes des deux familles se distingue nettement : conformément aux valeurs de cissions critiques respectives, les systèmes de la famille $< 110 > \{100\}$ ont davantage contribué au glissement que ceux de la famille $< 110 > \{110\}$. Cette dissymétrie dans l'activation des systèmes de glissement met l'accent sur l'anisotropie du comportement individuel des grains : la déformation viscoplastique sera en première approximation pilotée par les facteurs de Schmid associés aux systèmes de glissement de la première famille.

5.1.3.2 Première observation des effets de localisation intragranulaire

Il s'agit à présent de confirmer l'intuition issue de la première analyse des résultats et de mettre en évidence l'incompatibilité de déformation intergranulaire.

La figure 5.4 présente la distribution de déformation ε_{zz} dans l'agrégat à la fin de la simulation. Il apparaît clairement une forte dispersion des valeurs obtenues : l'écart-type pour la distribution de déformation $\overline{\varepsilon_{zz}^g}$ moyenne par grain est de 17% de la valeur effective, et les fluctuations entre extrema locaux atteignent une amplitude $\simeq 14$.

FIGURE 5.4 – Isovaleurs de déformation ε_{zz} à la fin du calcul

A l'échelle de l'agrégat, des effets de voisinage se produisent entre grains orientés différemment. Ces effets compliquent l'analyse du comportement local du VER et seront étudiés par la suite. Le paragraphe suivant s'attache en effet à décrire ces phénomènes de localisation en termes de distributions de contraintes de façon à obtenir une première estimation de l'effet de l'anisotropie mécanique intragranulaire sur le comportement des produits de fission gazeux.

5.2 Analyse des distributions de contraintes locales

Il s'agit dans ce paragraphe de décrire quelques grandeurs caractéristiques pour l'étude des phénomènes de concentrations de contraintes dans le polycristal. Deux aspects seront abordés principalement : la distribution de contraintes intragranulaires et le comportement des joints de grains. Dans les deux cas, le lien sera fait entre ces grandeurs mécaniques et la modélisation de l'évolution des populations de cavités décrite au chapitre 2.

5.2.1 Localisation de la contrainte intragranulaire

5.2.1.1 Distribution de pression hydrostatique moyenne

L'influence de la pression hydrostatique intragranulaire sur l'évolution des populations de cavités a fait l'objet d'un grand nombre d'études [Noirot 06]. La mise en place du modèle polycristallin permet de mesurer l'effet de l'incompatibilité de déformation associée à l'anisotropie des grains sur l'ensemble de ces phénomènes.

Nous nous intéressons dans un premier temps aux valeurs de pression hydrostatique moyenne par grain, définie sous la forme :

$$\overline{P}_{hyd}^g = \frac{1}{V_g} \int \frac{1}{3} tr(\boldsymbol{\sigma}) dV \quad (5.3)$$

où V_g est le volume du grain.

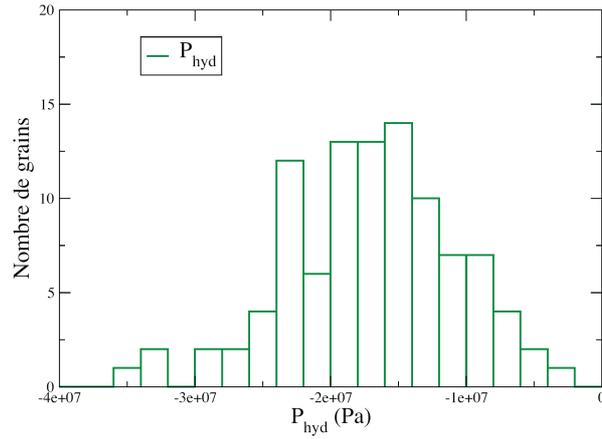


FIGURE 5.5 – distribution de pression hydrostatique moyenne par grain $\overline{P_{hyd}}^g$ à la fin de la simulation

La figure 5.5 représente la distribution de pression hydrostatique moyenne par grain $\overline{P_{hyd}}^g$ à $t = 500s$. Cette distribution doit être comparée au comportement effectif de l’agrégat, pour lequel $P_{hyd} = -16.7$ MPa : l’écart-type atteint 31% de cette valeur.

Il s’avère que l’anisotropie du cristal d’UO₂ induit une dispersion significative des valeurs de pression hydrostatique dans l’agrégat. Le chapitre 9 sera l’occasion d’étendre ces résultats au cas d’une sollicitation de type rampe de puissance en irradiation et de discuter plus longuement de l’effet de cette dispersion sur le comportement des cavités intragranulaires.

5.2.1.2 Localisation intragranulaire

L’approche à champ complet retenue pour cette étude permet d’analyser les répartitions de contraintes à l’intérieur de chaque grain. L’apparition de gradients de pression intragranulaire, par exemple, pourrait affecter le transport des produits de fission en situation d’irradiation.

Les tracés d’isovaleurs du champ de pression hydrostatique aux points de Gauss (voir figure 5.6- b.) obtenues à la fin de la simulation montrent toutefois un effet “Checkerboard” bien connu pour les matériaux incompressibles [Sani 81]. Deux méthodes ont été envisagées pour régulariser ce champ de contraintes :

- moyenner les valeurs des 5 points de Gauss de chaque élément pour obtenir un champ constant par éléments, comme présenté figure 5.6- c. ;
- extrapoler les valeurs du champ aux noeuds du maillage par une méthode des moindres carrés, lissant au passage la discontinuité inter-éléments.

La méthode d’extrapolation utilisée sera décrite en détail au chapitre 7, qui traite des différentes méthodes de calcul des contraintes aux joints de grains.

Afin de quantifier les gradients de pression intragranulaires, nous définissons l’écart-type en pression hydrostatique par grain :

$$\langle P_{hyd} \rangle^g = \sqrt{\frac{1}{V_g} \int \left[\frac{1}{3} tr(\boldsymbol{\sigma}) \right]^2 dV - (\overline{P_{hyd}}^g)^2} \quad (5.4)$$

avec $\overline{P_{hyd}}^g$ la valeur moyenne de pression hydrostatique dans le grain, définie à l’équation 5.3.

La figure 5.7 présente l’écart-type des pressions hydrostatiques par grain calculées à partir des champs de contraintes plus ou moins régularisés. Logiquement, l’écart-type est plus faible pour les

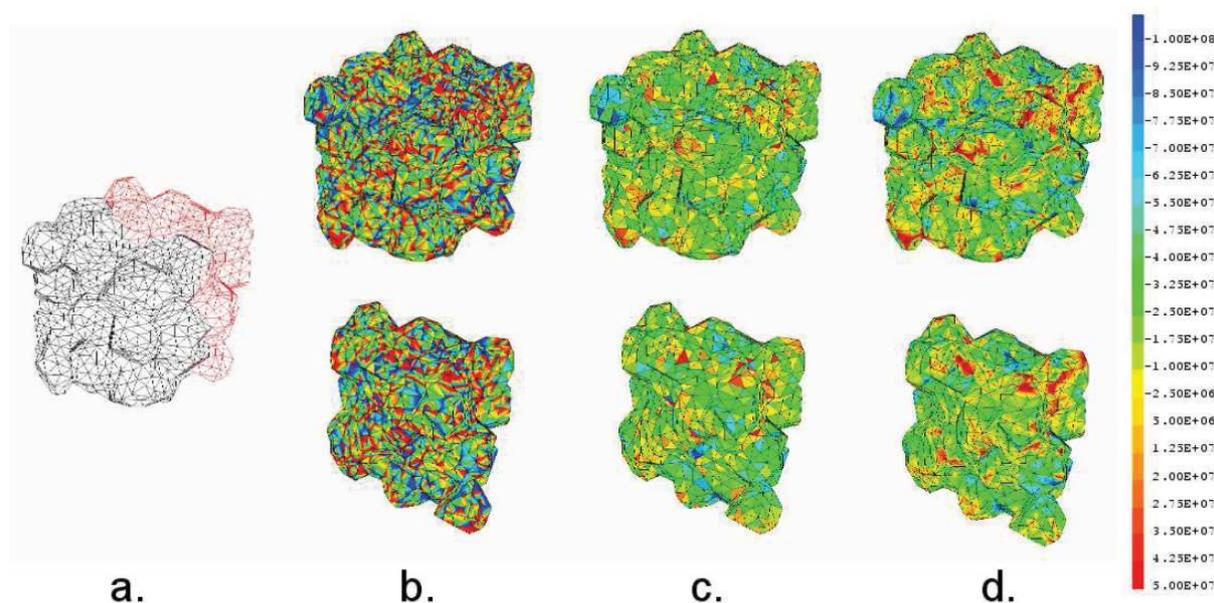


FIGURE 5.6 – Isovaleurs de pression hydrostatique (Pa) à la fin de la simulation, agrégat complet (ligne du haut) et vue tronquée (ligne du bas). a. maillage, b. champ aux points de Gauss, c. champ moyenné par élément, d. champ extrapolé aux noeuds

champs régularisés que pour celui initialement obtenu aux points de Gauss.

Par ailleurs, il est important de noter que les valeurs d'écart-type obtenues dans ce dernier cas sont nettement supérieures aux valeurs de pression hydrostatique moyennes par grains, sans qu'il soit possible de déterminer si cette amplitude de variation a pour origine des phénomènes physiques ou uniquement un artefact numérique.

Les avantages et limites de ces différentes méthodes de régularisation seront débattues plus en détail au chapitre 6. De façon générale, l'apparition de ces difficultés numériques limite la portée physique des résultats de ce calcul. Ces aspects devront être traités par la suite avant de pouvoir livrer une analyse fine des contraintes locales dans le cas d'un agrégat en situation d'irradiation en rampe de puissance.

5.2.2 Contraintes aux joints de grains

Un des principaux avantages de l'approche polycristalline réside dans la possibilité de modéliser finement l'interaction entre grains voisins. La bonne compréhension du comportement des joints de grains dans l' UO_2 est décisive à double titre : d'une part les joints de grains, du fait de leurs propriétés de diffusion, jouent le rôle de canaux privilégiés pour le transport des produits de fission (comme cela a déjà été présenté au chapitre 2) ; d'autre part, du strict point de vue mécanique, les phénomènes de glissement et de décohésion aux joints de grains ont été mis en évidence par des mesures expérimentales [Dherbey 02].

5.2.2.1 Aspects numériques

A ce stade, il convient de souligner que l'étude des contraintes aux joints de grains nécessite à minima de connaître les contraintes aux noeuds du maillage.

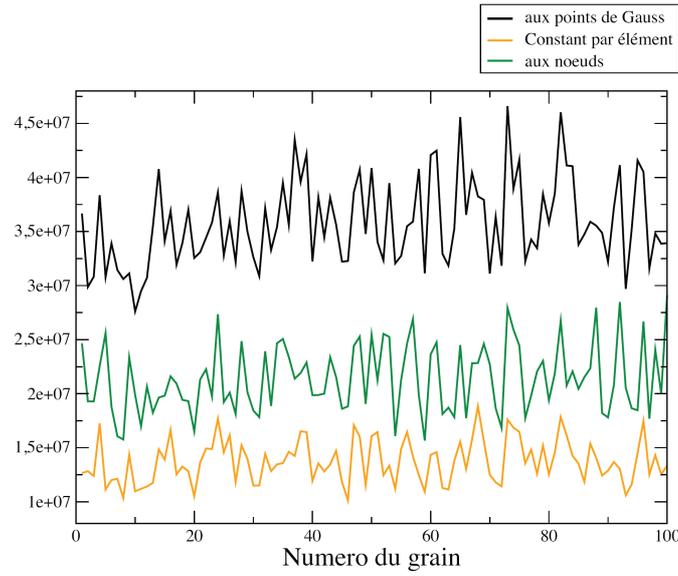


FIGURE 5.7 – Distribution de l'écart-type intragranulaire sur la pression hydrostatique $\langle P_{hyd} \rangle^g$ à la fin de la simulation

Dans le cas des résultats présentés dans ce chapitre, ces valeurs ont été obtenues par extrapolation aux noeuds du champ de contraintes défini aux points de Gauss. Pourtant, cette méthode n'est pas entièrement satisfaisante puisqu'en régularisant le champ de contrainte, en particulier à l'interface de deux grains, les effets de l'incompatibilité intergranulaire sur le comportement des joints de grains se trouvent eux-mêmes diminués.

Dans un premier temps, ces valeurs seront considérées comme suffisamment précises pour analyser le comportement du VER d'un point de vue qualitatif. La question du calcul des contraintes aux joints de grains sera toutefois plus longuement abordée au chapitre 7, avant de passer à l'étude du comportement de l'agrégat au cours d'une irradiation en rampe de puissance.

5.2.2.2 Contraintes normale et tangentielle aux joints de grains

Les distributions de contraintes normale et tangentielle ont respectivement été étudiées pour estimer la probabilité d'apparition de phénomènes d'ouverture et de glissement aux joints de grains. L'analyse proposée ici est très similaire à celle réalisée par [Diard 01] pour la compréhension des phénomènes d'endommagement intergranulaire dans la gaine des crayons combustibles.

Chaque joint de grain est défini comme l'interface entre deux grains, soit une portion de surface plane d'une cellule de Voronoï du VER. Dans un premier temps, l'analyse se limite à la répartition des contraintes normale σ_n et tangentielle σ_t moyennes, définies pour chaque joint de grain comme suit :

$$\sigma_n = \frac{1}{S_{jdg}} \int \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} \, dS \quad (5.5)$$

$$\sigma_t = \frac{1}{S_{jdg}} \int \|\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} - \sigma_n \mathbf{n}\| \, dS \quad (5.6)$$

La définition de σ_t donnée ici correspond simplement à la norme du vecteur classiquement utilisé $\boldsymbol{\sigma}_t = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} - \sigma_n \mathbf{n}$ dont les deux composantes sont associées aux deux degrés de liberté dans le plan de glissement.

5.2.2.3 Observations dans le cas d'un VER "homogène"

Il est intéressant de noter que dans le cas d'un agrégat homogène, dont tous les grains ont le même comportement et pour lequel $\sigma = \Sigma$, contrainte effective sur le VER, les équations 5.5 et 5.6 peuvent être réécrites dans le cas d'une sollicitation de type écouissage. En effet avec une contrainte constante sur l'agrégat :

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \Sigma_{zz} \end{pmatrix}$$

on déduit :

$$\sigma_n = n_z^2 \Sigma_{zz} \quad (5.7)$$

$$\sigma_t = \sqrt{\sigma_n^2 (1 - n_z^2) + n_z^2 (\Sigma_{zz} - \sigma_n)^2} \quad (5.8)$$

où Σ_{zz} est la contrainte macroscopique et n_z la composante de la normale au joint de grain colinéaire à (\mathbf{O}_z) . Cette distribution "homogène" est intéressante dans la mesure où, par comparaison, elle permet d'extraire une première quantification de l'effet d'incompatibilité intergranulaire sur le comportement des joints de grains.

5.2.2.4 Effet de l'anisotropie sur les contraintes aux joints de grains

Les figures 5.8 et 5.9 représentent respectivement la distribution de contraintes normales et tangentielles en fonction de l'orientation du joint de grain par rapport à l'axe de sollicitation. Les distributions "homogènes" correspondantes sont tracées en pointillés noirs à titre de comparaison.

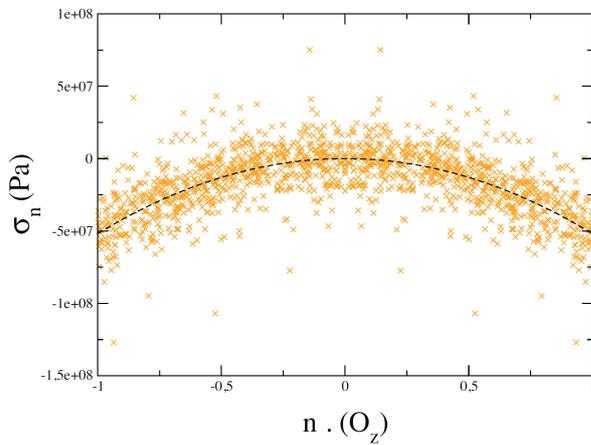


FIGURE 5.8 – Distribution de σ_n en fonction de l'orientation du joint de grain

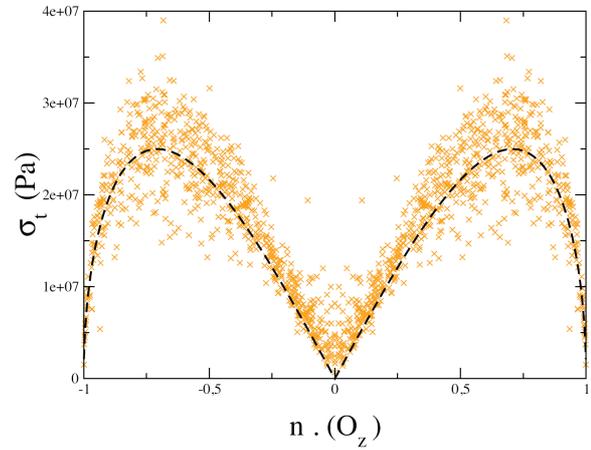


FIGURE 5.9 – Distribution de σ_t en fonction de l'orientation du joint de grain

Il apparait clairement que certaines propriétés de la distribution homogène sont conservées lors de l'introduction de l'incompatibilité intergranulaire. En particulier, les valeurs maximales de la contrainte tangentielle sont observées pour $|n_z| = \frac{\sqrt{2}}{2} = \cos 45^\circ$, c'est-à-dire pour les joints de grains à 45° de l'axe de compression, tandis que les contraintes normales les plus importantes (en valeur absolue) sont observées pour $|n_z| \rightarrow 1$, soit pour les joints de grains orthogonaux à l'axe.

Malgré tout, l'anisotropie du comportement intragranulaire introduit une nouvelle fois une dispersion significative des valeurs de contraintes autour de la valeur "homogène". En particulier il est

intéressant de noter que, même pour une sollicitation macroscopique de compression pure, certains joints de grains se trouvent sollicités en traction, situation qui peut conduire à une fissuration intergranulaire du combustible.

5.2.2.5 Cas de la pression hydrostatique aux joints de grains

De la même manière que pour le comportement intragranulaire, la pression hydrostatique aux joints de grains joue un rôle significatif sur le comportement des cavités intergranulaires.

La figure 5.10 présente la distribution de pression hydrostatique moyenne aux joints de grains en fin de calcul. Comme précédemment, les résultats montrent une dispersion significative autour de la valeur de pression hydrostatique moyenne dans l'agrégat.

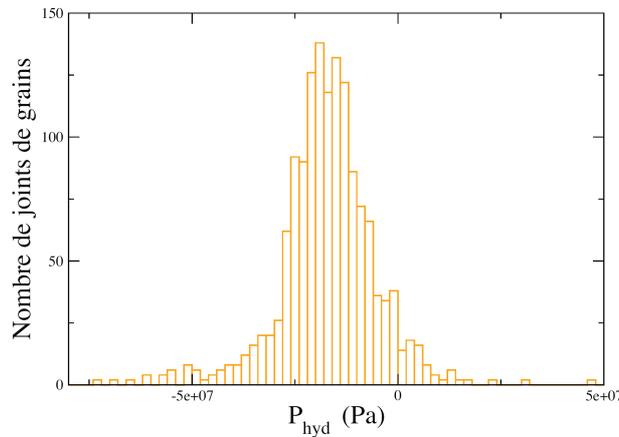


FIGURE 5.10 – distribution de pression hydrostatique moyenne aux joints de grains $\overline{P_{hyd}^{jdg}}$ à la fin de la simulation

L'écart type obtenu ici est plus important que dans le cas de la pression hydrostatique intragranulaire et atteint environ 70% de la pression hydrostatique effective.

Il faut malgré tout faire preuve de prudence quant à la signification physique de ces résultats étant donné que les phénomènes étudiés ici sont encore plus localisés que dans le cas du comportement intragranulaire. D'un point de vue numérique en particulier, rien n'assure à ce stade que le nombre d'éléments utilisés (entre 1 et 40 selon les joints de grains) soit suffisant pour modéliser de façon satisfaisante le comportement des joints de grains.

5.3 Conclusions de l'analyse du comportement local du VER

Cette simulation a été l'occasion d'une première étude en profondeur des effets de localisation du comportement mécanique de l'agrégat. Les résultats obtenus ont permis de soulever un certain nombre de phénomènes qu'il sera important d'analyser plus en détail dans le cas d'une irradiation en rampe de puissance. Le calcul a aussi permis de soulever un certain nombre de difficultés, en particulier numériques, qu'il convient de lever avant d'aller plus loin dans la simulation.

5.3.1 Revue des résultats obtenus

L'analyse des résultats a permis d'illustrer l'effet de l'incompatibilité intergranulaire sur le comportement local du polycristal.

Du point de vue des contraintes intragranulaires, ceci s'est traduit par l'étalement de la distribution des pressions hydrostatiques moyennes intragranulaires ; cette grandeur joue un rôle significatif dans le comportement des produits de fissions puisqu'elle est utilisée par les codes de transport des produits de fission comme sollicitation mécanique des cavités intragranulaires.

Concernant les joints de grains, l'accent a été mis sur l'estimation de la probabilité d'occurrence du glissement et de la décohésion intergranulaire. Bien que l'agrégat soit soumis à une sollicitation de contrainte uniaxiale, certains joints de grains se trouvent en situation de traction du fait de l'incompatibilité intergranulaire.

5.3.2 Problèmes de sensibilité et choix du VER

Cette première analyse en post-traitement a mis en évidence les difficultés numériques liées à l'analyse des contraintes locales.

Avant de passer à l'étude d'une rampe de puissance, il convient d'étudier en détail la sensibilité des phénomènes de localisation au maillage (nombre et type d'éléments), mais aussi de statuer sur la manière de calculer les contraintes aux joints de grains. Ces questions, qui seront traitées aux chapitres 6 et 7, visent à déterminer une convergence numérique pour les grandeurs étudiées et à mettre en place une méthode robuste de calcul de ces grandeurs.

Le chapitre suivant a pour vocation de résoudre en partie ces difficultés. Seront abordées successivement les difficultés numériques liées à la prise en compte de la condition d'incompressibilité du point de vue des éléments finis et à la sensibilité de la réponse du VER au raffinement du maillage retenu.

Chapitre 6

Etude de sensibilité au choix du maillage

Les résultats présentés au chapitre précédent ont mis en évidence la nécessité d’analyser finement la sensibilité du comportement local du VER au raffinement et au type d’éléments utilisés pour le maillage.

Ce chapitre reprend les résultats d’une première étude de sensibilité menée pour estimer la dépendance de la réponse du modèle polycristallin au choix du maillage. Dans un premier temps sont rappelés quelques éléments connus sur l’utilisation de modèles de comportement incompressible dans le cadre de la méthode des éléments finis. Ensuite sont présentés les résultats de l’étude paramétrique proprement dite en termes de sensibilité de la réponse macroscopique et locale au maillage.

Sommaire

6.1	Plasticité incompressible et éléments finis	132
6.1.1	Blocage volumétrique des éléments	132
6.1.2	Test du poinçon de Prandtl	133
6.1.3	Incompressibilité et effet “checkerboard”	136
6.2	Sensibilité au choix du maillage éléments finis	137
6.2.1	Description de l’étude	137
6.2.2	Sensibilité du comportement macroscopique	139
6.2.3	Comportement intragranulaire	140
6.2.4	Comportement aux joints de grains	143
6.3	Conclusions de l’étude de sensibilité	144

Plusieurs grandeurs d'intérêt caractéristiques du comportement du polycristal ont été présentées au chapitre 5. Nous nous proposons maintenant d'analyser la sensibilité de ces grandeurs au choix du maillage éléments finis pour la simulation.

Le paragraphe 6.1 rappelle dans un premier temps quelques éléments de bibliographie concernant les difficultés engendrées par la condition d'incompressibilité dans un calcul par éléments finis. Le paragraphe 6.2 quant à lui résume les résultats obtenus pour différents maillages dans le cas d'une simulation d'un essai à Déformation à Vitesse Constante, similaire à celle présentée au chapitre 5.

6.1 Plasticité incompressible et éléments finis

Les différentes modélisations (PC_U et Id_2) de la déformation viscoplastique du monocristal d' UO_2 présentées au chapitre 4 ont en commun qu'elles décrivent des mécanismes de fluage incompressible. Cette hypothèse d'incompressibilité rend compte de la conservation de la matière en l'absence de porosités.

Pour mieux comprendre l'effet de cette hypothèse d'incompressibilité sur le calcul éléments finis, considérons tout d'abord la décomposition classique du tenseur de contraintes en partie sphérique et déviatorique (6.1) :

$$\boldsymbol{\sigma} = p\mathbf{I} + \boldsymbol{\sigma}^d(\mathbf{u}) \quad (6.1)$$

avec $p = \frac{1}{3}tr(\boldsymbol{\sigma})$ et $\boldsymbol{\sigma}^d = dev(\boldsymbol{\sigma})$. Dans le cas d'un comportement plastique incompressible, les comportements déviatorique et sphérique peuvent être dissociés sous la forme suivante [Chiumenti 04] :

$$p = \mu tr(\boldsymbol{\varepsilon}) = \mu \nabla \mathbf{u} \quad (6.2)$$

$$\boldsymbol{\sigma}^d = 2G(\boldsymbol{\varepsilon}^d - \boldsymbol{\varepsilon}^p) \quad (6.3)$$

où (μ, G) sont respectivement le module de compressibilité et le module de cisaillement élastiques du matériau et $(\boldsymbol{\varepsilon}^d, \boldsymbol{\varepsilon}^p)$ la partie déviatorique de la déformation totale (resp. plastique). Dès lors l'équation d'équilibre peut être réécrite :

$$\nabla \boldsymbol{\sigma} = 0 \Leftrightarrow \begin{cases} \nabla \boldsymbol{\sigma}^d + \nabla p = 0 \\ \nabla \mathbf{u} - \frac{1}{\mu} p = 0 \end{cases} \quad (6.4)$$

Dans le cas d'un matériau parfaitement incompressible ($\mu \rightarrow \infty$), la condition d'incompressibilité décrite dans l'équation (6.4) devient :

$$\nabla \mathbf{u} = \varepsilon_{ii} = 0 \quad (6.5)$$

Les difficultés liées à la prise en compte de l'incompressibilité dans le cadre de la méthode des éléments finis ont déjà été largement décrites (voir en particulier [Nagtegaal 74] et [Sani 81]) et seront l'objet de rappels durant la suite du paragraphe.

6.1.1 Blocage volumétrique des éléments

La condition d'incompressibilité (6.5) peut être reformulée comme contrainte sur les fonctions de forme d'un élément donné. Dans le cas d'une grille régulière 2D d'éléments à 4 noeuds isoparamétriques par exemple, pour laquelle le déplacement en chaque noeud peut s'écrire sous la forme :

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} u_x \\ u_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_x + b_x x + c_x y + d_x xy \\ a_y + b_y x + c_y y + d_y xy \end{pmatrix} \quad (6.6)$$

En tenant compte de la condition d'incompressibilité $\varepsilon_{ii} = 0$, il vient $\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} = 0$, d'où immédiatement $d_x = d_y = b_x + c_y = 0$.

De cette triple contrainte, il résulte que $\frac{\partial \varepsilon_{xx}}{\partial x} = \frac{\partial \varepsilon_{yy}}{\partial y} = 0$, ce qui signifie in fine que, dans ce cas particulier, les déformations ε_{xx} et ε_{yy} sont constantes dans toute la grille. Ce bref exemple permet de mettre en évidence l'apparition de contraintes (au sens de relations à vérifier entre les degrés de liberté de l'élément) associées à la formulation de l'incompressibilité en éléments finis et dénuées de fondements physique.

Pour rendre compte de façon satisfaisante d'un comportement plastique incompressible, un maillage par éléments finis doit donc proposer un ratio minimum entre le nombre de degrés de liberté et le nombre de contraintes liées à l'incompressibilité. Il est difficile d'extraire un critère définitif de ce point de vue puisque ce ratio dépend du type d'éléments sélectionné mais aussi de la connectivité du maillage [Nagtegaal 74]. Malgré tout, on peut retenir que pour l'essentiel des éléments de bas niveau d'interpolation (linéaire et quadratique) le rapport degrés de liberté / contraintes dues à l'incompressibilité est inférieur à 1.

Type d'élément	Contraintes / élément	Noeuds / élément	ddl / élément
Tetraèdre linéaire	1	1/5	3/5
Cube linéaire	7	1	3/7
Tétraèdre quadratique	4	7/5	21/20
Cube quadratique	≥ 16	4	$\leq 3/4$

TABLE 6.1 – Ratio degrés de liberté / contraintes d'incompressibilité pour différents types éléments finis arrangés dans une grille régulière [Nagtegaal 74]

Le tableau 6.1 reprend les valeurs de ce rapport degrés de liberté / contraintes d'incompressibilités pour quelques éléments 3D classiques arrangés de façon à mailler une grille cubique régulière. Dans le cas où ce rapport est inférieur à 1, les relations entre degrés de liberté imposées par la condition d'incompressibilité peuvent conduire à des phénomènes de blocages décrits plus haut. A ce stade, il est intéressant de noter que de tous les éléments finis disponibles dans CAST3M, seul le tétraèdre à 10 noeuds offre un compromis satisfaisant pour la modélisation d'un comportement plastique incompressible.

6.1.2 Test du poinçon de Prandtl

6.1.2.1 Présentation

Le test du poinçon de Prandtl en déformations planes est un outil bien connu pour valider la réponse d'un maillage éléments finis dans le domaine de la plasticité incompressible (voir notamment [Askes 99]). Le calcul modélise l'enfoncement d'un poinçon infiniment rigide dans un demi-plan infini, les conditions aux limites étant définies à la figure 6.1 ci-dessous.

Dans le cas d'un modèle élasto-plastique incompressible, la courbe réponse Force de réaction F_z en fonction du déplacement normal imposé U_n devrait atteindre une valeur limite associée à un plateau constant. Pour des raisons de blocage volumétrique des éléments présentées dans le

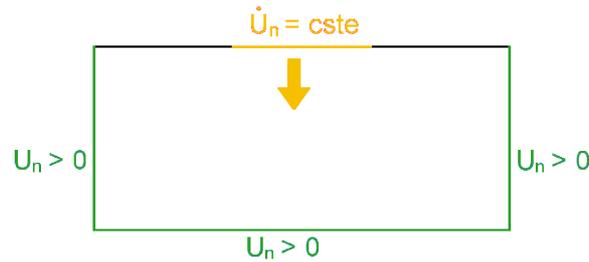


FIGURE 6.1 – Test du poinçon de Prandtl : conditions aux limites

paragraphe précédent, ce chargement limite n'est atteint que pour certains types d'éléments et certains arrangements, comme nous allons le voir.

6.1.2.2 Résultats

Ce test a été repris pour différents arrangements d'éléments finis implémentés dans CAST3M, en faisant appel à un modèle élasto-plastique parfait. Comme pour les lois de comportement présentées au chapitre 4, seule la partie plastique du comportement est incompressible.

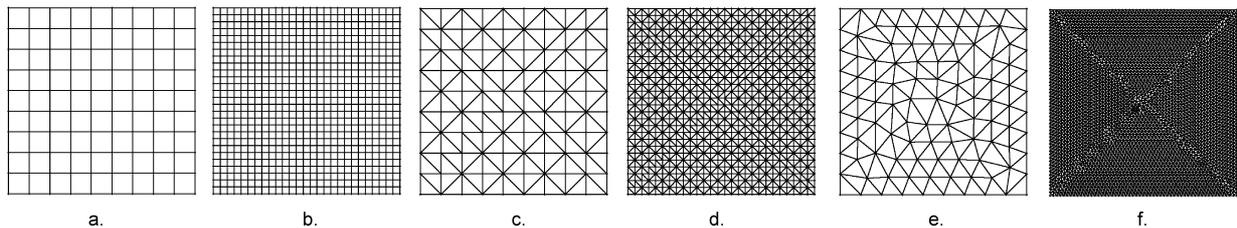


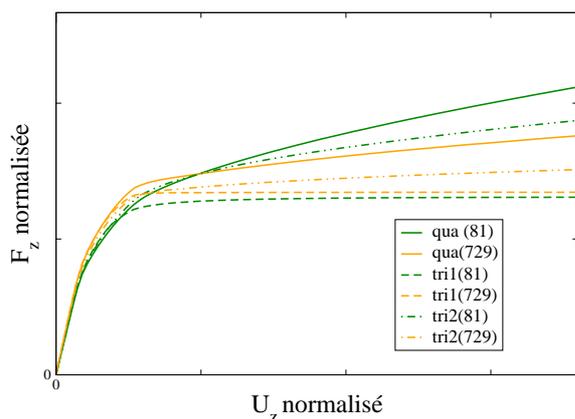
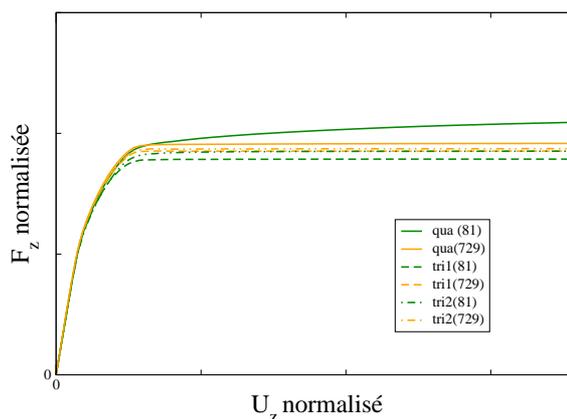
FIGURE 6.2 – Test du poinçon de Prandtl : maillages utilisés. a. qua(81), b. qua(729), c. tri(81), d. tri(729), e. tri2(81), f. tri2(729)

Différentes combinaisons de raffinement de maillage et d'arrangement des éléments ont été étudiées, et sont présentées figure 6.2. Chaque maillage est identifié par la géométrie des d'éléments employés (quadrangles ou triangles) et le niveau de raffinement, sous la forme *type d'élément*(nombre de noeuds sur le contour). Dans le cas des éléments triangles, deux arrangements sont proposés et désignés respectivement par tri(n) et tri2(n).

Les réponses obtenues sont présentées aux figures 6.3 et 6.4.

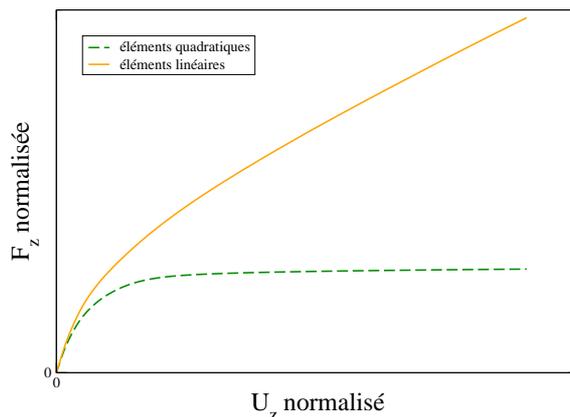
Il apparaît clairement que certains maillages échouent à modéliser l'apparition du plateau de chargement constant. Dans le cas des éléments linéaires seuls les triangles à trois noeuds arrangés selon un grille régulière (maillages c. et d.) permettent de retrouver cet effet de seuil, comme le montre la figure 6.3. Dans le cas des éléments quadratiques par contre (voir figure 6.4), seule la courbe réponse du maillage le plus grossier (a.) de quadrilatères ne présente pas de saturation.

Ces premiers calculs montrent finalement que, pour prendre en compte correctement la condition d'incompressibilité plastique dans un calcul par éléments finis, il est nécessaire d'utiliser des éléments dont le degré d'interpolation est supérieur ou égal à deux. Le paragraphe suivant va approfondir ces résultats en se rapprochant d'un calcul tels que ceux réalisés précédemment sur les agrégats.

FIGURE 6.3 – Test du poinçon de Prandtl :
courbe réponse pour les éléments linéairesFIGURE 6.4 – Test du poinçon de Prandtl :
courbe réponse pour les éléments quadratiques

6.1.2.3 Cas du modèle PC_U

Il est en effet nécessaire de conforter les résultats précédents en menant un calcul dans des conditions plus proches de celles d'un calcul d'agrégat tel que présenté au chapitre 5.

FIGURE 6.5 – Résultante en fonction du déplacement imposé : test du Poinçon de Prandtl pour le
modèle PC_U , cas de tétraèdres linéaires et quadratiques

Le test du poinçon de Prandtl a donc été repris et mis en place pour des éléments 3D. Les conditions aux limites sont similaires à celle présentées à la figure 6.1 en imposant sur la troisième direction un déplacement nul des faces extérieures. En termes de comportement mécanique, le modèle PC_U a été retenu, toujours de façon à se rapprocher du calcul présenté au chapitre 5.

Deux calculs ont été effectués avec des maillages de tétraèdres linéaires (respectivement quadratiques) arrangés de façon aléatoire dans le domaine. Les résultats de la simulation sont présentés à la figure 6.5. Une nouvelle fois les éléments linéaires sont mis en défaut et conduisent à une surestimation de la rigidité du modèle, tandis que les tétraèdres à 10 noeuds permettent de retrouver le seuil attendu.

Tous ces résultats semblent montrer que les éléments quadratiques sont mieux adaptés à la modélisation de la plasticité incompressible. L'étude de sensibilité menée au paragraphe 6.2 sera l'occasion d'analyser plus en détail les conséquences du choix du type d'éléments dans le cas d'un calcul d'homogénéisation périodique sur le polycristal.

6.1.3 Incompressibilité et effet “checkerboard”

L’effet “checkerboard” (traduisible par “effet damier”) a déjà été mentionné au chapitre 5, lors de l’analyse du tracé d’isovaleurs de pression hydrostatique dans l’agrégat présenté figure 5.6. Il se caractérise par d’importantes oscillations de la solution en pression d’un calcul éléments finis, les déplacements étant eux correctement estimés.

Nous revenons plus en détail sur ce phénomène et sur son origine au cours de ce paragraphe.

6.1.3.1 Modes de pression

L’effet checkerboard est bien connu en particulier dans les domaines de l’optimisation topologique des structures (voir notamment [Bruggi 08]) et de l’étude des fluides incompressibles. Initialement décrit par [Sani 81], il apparaît naturellement à partir du système d’équations (6.4). Dans le cas d’un matériau purement incompressible (pour lequel $K \rightarrow \infty$) ce système devient :

$$\nabla \boldsymbol{\sigma}^d + \nabla p = 0 \quad (6.7)$$

$$\nabla \mathbf{u} = 0 \quad (6.8)$$

En réécrivant ce problème sous forme variationnelle et en introduisant une approximation discrétisée des fonctions pression $p(\mathbf{x})$ et déplacement $\mathbf{u}(\mathbf{x})$, ce système peut être mis sous forme matricielle :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{K} & \mathbf{C} \\ \mathbf{C}^T & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{U} \\ \mathbf{P} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{g} \end{pmatrix} \quad (6.9)$$

avec :

- \mathbf{U} le vecteur des inconnues nodales en déplacement ;
- \mathbf{P} le vecteur des inconnues nodales en pression ;
- \mathbf{f} et \mathbf{g} les conditions aux limites en force et déplacement.

Sont appelés “modes de pressions” les solutions du système matriciel (6.9) avec $\mathbf{f} = \mathbf{0}$, $\mathbf{g} = \mathbf{0}$, $\mathbf{U} = \mathbf{0}$ et \mathbf{P} solution non triviale de $\mathbf{C}\mathbf{P} = \mathbf{0}$. Ces modes de pression n’ont pas nécessairement de signification physique mais en tant que solutions du problème, ils peuvent parasiter la réponse du matériau jusqu’à la noyer dans le bruit numérique.

6.1.3.2 Manifestation de l’effet checkerboard

[Sani 81] a étudié l’apparition des modes de pression dans le cas d’un arrangement de 4 éléments 2D quadrilatères à 4 noeuds tel que celui présenté figure 6.6.

Pour un tel arrangement, il existe deux vecteurs \mathbf{P} indépendants satisfaisant $\mathbf{C}\mathbf{P} = \mathbf{0}$:

- $\mathbf{P} = \alpha(1, 1, 1, 1)^T$, correspondant à la pression hydrostatique réelle dans le maillage ;
- $\mathbf{P} = \beta(\frac{1}{A_1}, -\frac{1}{A_2}, \frac{1}{A_3}, -\frac{1}{A_4})^T$ où les A_i sont les aires des triangles représentés figure 6.7.

C’est ce deuxième mode, issu uniquement de la résolution numérique du problème initial, qui est appelé effet checkerboard du fait de l’alternance des signes selon un motif $P_j = \pm \frac{\beta}{A_j}$. La présence de ce motif génère des oscillations de la contrainte dont l’amplitude peut masquer la réponse physique du système.

Comme nous l’avons vu au cours de l’exemple du chapitre 5, cet effet checkerboard peut se manifester lors d’un calcul d’agrégat avec les hypothèses mises en place dans les parties précédentes. Bien entendu, il sera nécessaire par la suite de prendre en compte l’impact de cette réponse parasite lors de l’analyse des contraintes locales dans l’agrégat.

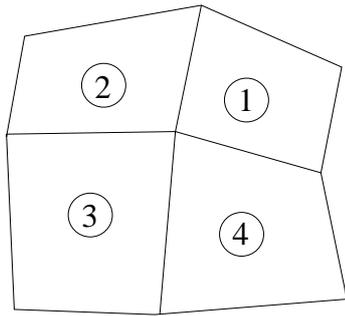
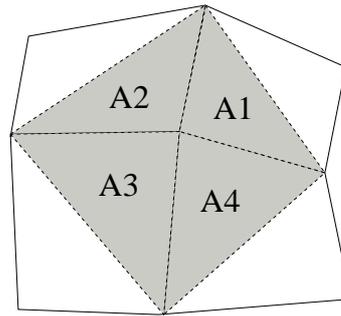


FIGURE 6.6 – Arrangement générique de 4 éléments quadrilatères à 4 noeuds

FIGURE 6.7 – Triangles A_i associés au mode checkerboard

Afin de mieux estimer les conséquences des problèmes numériques présentés dans ce paragraphe sur la réponse du VER, une première étude de sensibilité au choix du maillage éléments finis va maintenant être présentée.

6.2 Sensibilité au choix du maillage éléments finis

Le paragraphe 6.1 a été l'occasion de prendre conscience d'un certain nombre de difficultés numériques déjà entrevues à l'occasion du chapitre 5. Il s'avère en particulier que la prise en compte de la condition d'incompressibilité dans la méthode des éléments finis peut aboutir à une surestimation de la réponse seuil d'un système, voire à l'apparition de contraintes parasites issues de la résolution numérique du problème.

Ce paragraphe vise à livrer une première analyse de ces difficultés dans le cas d'une simulation d'un essai à Déformation à Vitesse Constante sur un polycristal d' UO_2 . L'objectif est par ailleurs d'arriver à un compromis satisfaisant du point de vue du raffinement du maillage entre la précision des résultats obtenus et le coût du calcul.

6.2.1 Description de l'étude

6.2.1.1 Chargement mécanique

L'étude concerne la simulation d'un essai de traction à vitesse de déformation imposée. De la même manière que pour le calcul exemple du chapitre 5, le taux de déformation \dot{E}_{zz} est imposé constant. Les composantes du tenseur de contrainte macroscopique sont imposées nulles à l'exception de Σ_{zz} . Les caractéristiques de la sollicitation sont données au tableau 6.2.

$\dot{E}_{zz} \text{ (s}^{-1}\text{)}$	2.542e-5
$t_{fin} \text{ (s)}$	1000

TABLE 6.2 – Caractéristiques de la sollicitation

6.2.1.2 Modèle de VER et maillages

Le VER retenu est un agrégat 3D périodique à 10 grains (voir figure 6.8). Le calcul est effectué pour différents maillages de tétraèdres linéaires (indicés l_i) ou quadratiques (indicés q_j), dont les

propriétés sont rappelées au tableau 6.3.

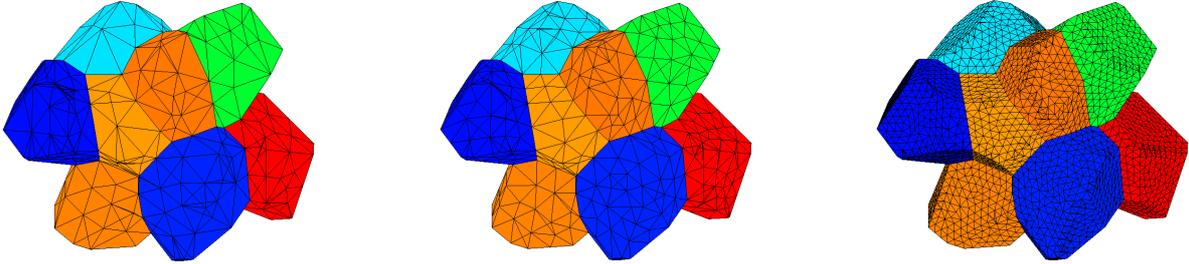


FIGURE 6.8 – Visualisation des maillages l_1 , l_3 , l_5

Par la suite, pour estimer le niveau de raffinement des différents maillages, il sera fait appel au paramètre $N_l = \sqrt[3]{\frac{V_{VER}}{V_{el}}}$, avec V_{VER} le volume du VER et V_{el} le volume moyen des éléments du maillage. Ce paramètre (adimensionné) donne le rapport moyen des dimensions du polycrystal et des éléments utilisés pour le maillage.

	l_1	l_2	l_3	l_4	l_5	l_6	l_7	q_1	q_2	q_3
$N_l = \sqrt[3]{\frac{V_{VER}}{V_{el}}}$	13.8	14.8	16.2	21.6	39.4	49.2	65.3	14.8	21.6	28.5
nombre de noeuds ^g	49	62	87	203	1130	2137	4859	395	1395	3190
nombre d'éléments ^g	178	234	341	892	5670	11099	26101	234	894	2119

TABLE 6.3 – Caractéristiques des différents maillages

Etant donné la gamme de vitesses de déformation considérée, le glissement des dislocations pilote la déformation viscoplastique dans les grains. Pour cette raison, le modèle de comportement utilisé est le modèle PC_U , décrit au chapitre 4.2.

6.2.1.3 Objet de l'étude

Afin de caractériser la dépendance de la réponse du VER au choix du maillage, un certain nombre de grandeurs doivent être analysées en post-traitement. Cette analyse reprend pour l'essentiel les éléments présentés au chapitre 5. Au niveau macroscopique, on s'intéresse à l'évolution de la contrainte Σ_{zz} , caractéristique du pic de contrainte, au cours du temps. L'évolution de la densité de dislocation est brièvement présentée pour compléter l'étude de la réponse effective du VER.

Quelques grandeurs sont particulièrement étudiées en termes de localisation : pour le comportement intragranulaire, il s'agit de la pression hydrostatique dans les grains (valeur moyenne et écart-type). En ce qui concerne le comportement intergranulaire, nous nous intéresserons à la pression hydrostatique, aux contraintes normales et tangentielles aux joints de grains. Les valeurs prises par ces différentes contraintes sont relevées à des instants particuliers du calcul : au pic de contrainte (pour lequel la valeur de Σ_{zz} est maximale), pendant l'adoucissement et à l'instant final du calcul.

En tenant compte des considérations développées à l'occasion du paragraphe 6.1 concernant les difficultés engendrées par la prise en compte de l'incompressibilité dans un calcul par éléments finis,

c'est le maillage d'éléments quadratiques le plus raffiné q_3 qui sera pris comme solution référence de la simulation.

6.2.2 Sensibilité du comportement macroscopique

6.2.2.1 Contrainte macroscopique

Les résultats obtenus montrent que la contrainte effective dans l'agrégat est très peu sensible au choix du maillage. La figure 6.9 représente l'erreur relative $e = \frac{|\Sigma_{zz}^{l_i}(t) - \Sigma_{zz}^{q_3}(t)|}{|\Sigma_{zz}^{q_3}|}$ entre la solution de référence q_3 et les différents maillages d'éléments linéaires l_i à trois instants particuliers du calcul :

- pour $t = 55$ s, au pic de contrainte ;
- pour $t = 120$ s, lors de l'adoucissement ;
- pour $t = 1000$ s, en fin de calcul ;

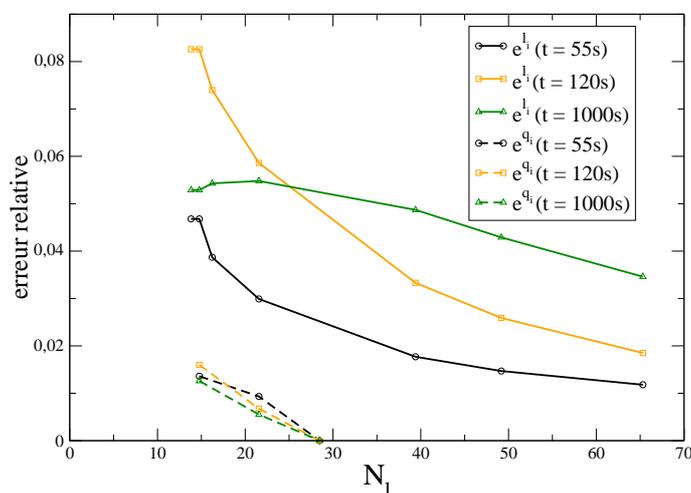


FIGURE 6.9 – Erreur relative sur la contrainte effective Σ_{zz} en fonction du raffinement du maillage par rapport au résultat de référence q_3 à différents instants : au pic de contrainte (55 s), lors de l'adoucissement (120 s) et en fin de simulation (1000 s)

Même dans le cas le plus défavorable, l'erreur relative ne dépasse pas 9%. Cette stabilité de la réponse effective, déjà observée par [Barbe 01], vient confirmer a posteriori le choix de maillage utilisé lors de la procédure d'identification mise en place au chapitre 4, laquelle ne tenait compte que de la contrainte macroscopique dans le VER.

L'analyse de la contrainte macroscopique montre aussi que, de façon générale, les éléments linéaires sont trop rigides et mènent à une surestimation de la contrainte. Dans le cas des éléments quadratiques, il s'avère que même avec le maillage le plus grossier l'erreur commise ne dépasse pas 2%. Ces résultats viennent confirmer les conclusions du paragraphe 6.1, selon lesquelles les éléments quadratiques sont mieux à même de modéliser le comportement d'un matériau incompressible.

Il est intéressant de remarquer que dans la première partie du calcul (ici pour $t = 55$ s et $t = 120$ s) le maillage q_1 donne des résultats similaires à ceux obtenus avec maillage linéaire le plus fin (l_7) tout en ayant un nombre de degrés de liberté beaucoup plus faible. L'écart observé en fin de simulation peut être expliqué par l'importance croissante des phénomènes de localisation de contraintes au cours de l'essai.

6.2.2.2 Densité de dislocations

L'évolution de la densité de dislocations moyenne dans l'agrégat ρ^1 permet d'obtenir davantage d'information sur le comportement du VER. En particulier, la cinétique des dislocations étant directement liée à l'activité en glissement, elle offre quelques éléments de caractérisation du comportement viscoplastique des grains.

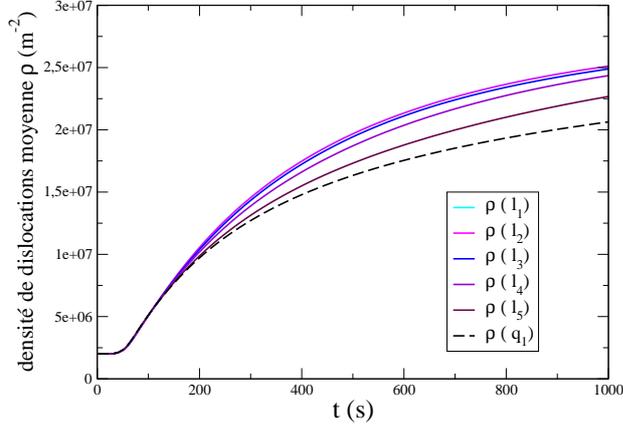


FIGURE 6.10 – Evolution de la densité de dislocation moyenne au cours du temps pour différents maillages linéaires (l_i) et quadratiques (q_i)

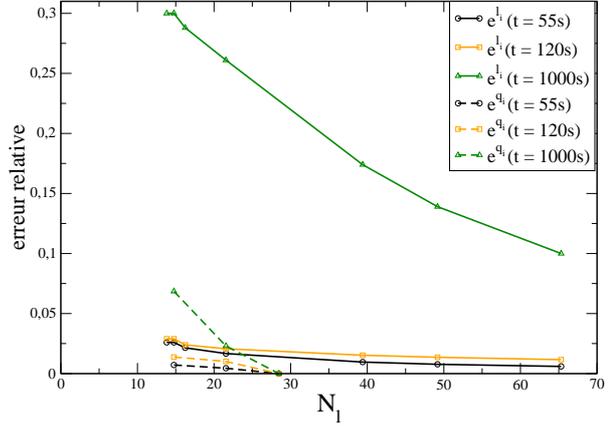


FIGURE 6.11 – Erreur relative sur la densité de dislocation moyenne ρ en fonction du raffinement du maillage par rapport au résultat de référence q_3 à différents instants : au pic de contrainte, lors de l'adoucissement et en fin de simulation

La figure 6.10 présente l'évolution de ρ au cours du temps pour différents maillages. De la même manière que pour la simulation présentée au chapitre 5, la densité de dislocation continue d'augmenter significativement après le pic de contrainte, jusqu'à tendre progressivement vers la saturation à la fin du calcul. La densité de dislocation affecte l'hétérogénéité des distributions de contraintes dans le VER, comme nous l'avons vu au paragraphe 5.1.2. Il est raisonnable de considérer que l'état final obtenu (tant en termes de contraintes que de variables internes) à l'approche de la saturation des densités de dislocations est représentatif du type de localisation observable avec ce modèle de plasticité cristalline.

Par ailleurs, les maillages linéaires l_i tendent à surestimer significativement la densité moyenne de dislocations, comme l'illustre la figure 6.11. Ce résultat est à mettre en parallèle avec ceux obtenus au paragraphe précédent : du fait du comportement trop raide des éléments linéaires, la surestimation de la contrainte dans le polycristal provoque une augmentation relative du glissement des dislocations et donc une augmentation de la densité de dislocations.

6.2.3 Comportement intragranulaire

6.2.3.1 Première analyse de la pression hydrostatique dans les grains

Le rôle de la pression hydrostatique intragranulaire sur le transport des produits de fission a déjà été décrit au chapitre 5. Il s'agit ici de déterminer le niveau de raffinement de maillage nécessaire pour estimer correctement cette grandeur.

1. Par définition $\rho = \frac{1}{N_s} \sum_{s=1}^{N_s} \frac{1}{V} \int_{V_{VER}} \rho_s dV$

Les tracés d'isovaleurs de pression hydrostatique dans les grains mettent malheureusement en évidence l'effet "checkerboard" observé précédemment et décrit plus en détail au paragraphe 6.1. La figure 6.12 représente la pression hydrostatique dans un grain (repéré en orange sur la figure) à la fin de la simulation pour un maillage d'éléments linéaires (l_5) et un maillage d'éléments quadratiques (q_1). Comme précédemment, sont présentés les différents champs tracés respectivement aux points de Gauss (6.12a.), moyenné par éléments (6.12.b.) ou extrapolé aux noeuds (6.12.c.) via une méthode des moindres carrés, qui sera décrite au chapitre 7.

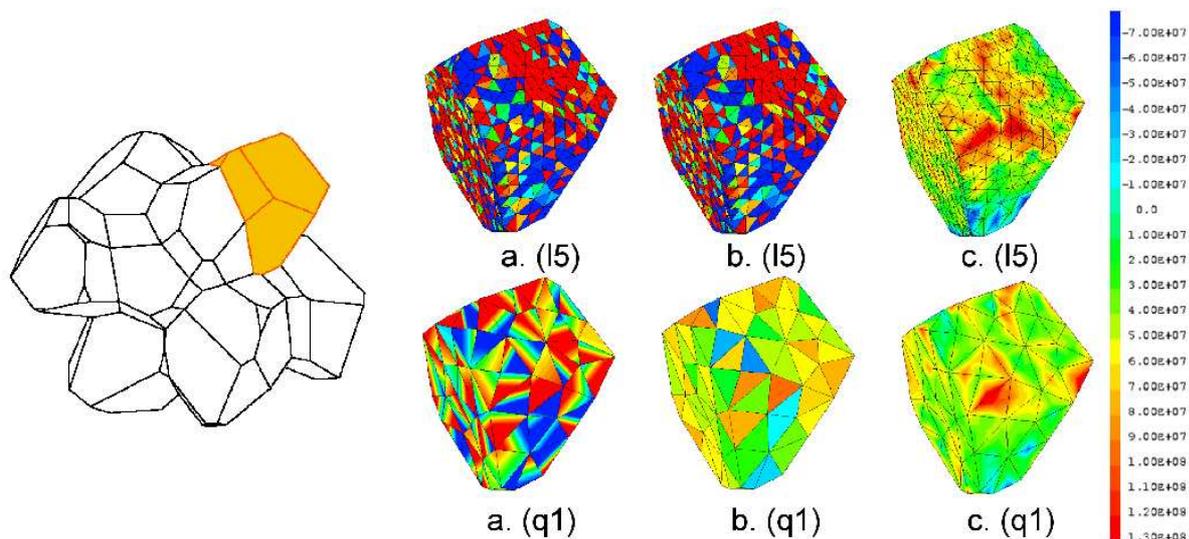


FIGURE 6.12 – Pression hydrostatique dans un grain à la fin du calcul : champ de contraintes aux points de Gauss (a.), moyenné par élément (b.) et extrapolé aux noeuds (c.). Cas des maillages d'éléments linéaires (l_5) et quadratiques (q_1)

L'analyse des contraintes locales nous confronte au dilemme suivant : si le champ extrapolé aux noeuds (6.12.c.) paraît être le seul pertinent pour l'observation "visuelle" des effets de localisation intragranulaire, du point de vue numérique il n'en reste pas moins le plus douteux à la fois du fait de l'extrapolation proprement dite (réalisée via une méthode des moindres carrés, qui introduit une incertitude supplémentaire) et du fait que les incompatibilités ont tendance à être lissées par cette régularisation.

Par la suite, il conviendra de s'assurer que l'erreur introduite par ces différentes méthodes d'extrapolation n'invalide pas l'analyse qui peut être faite de ces champs. C'est un des points auxquels les paragraphes suivants vont s'attacher à répondre.

6.2.3.2 Pression hydrostatique moyenne dans les grains

Une première information concernant la répartition de pression hydrostatique dans l'agrégat est la valeur moyenne par grain $\overline{P_{hyd}^g}$. Non seulement cette valeur quantifie en première approximation les effets de l'incompatibilité intergranulaire (due aux orientations différentes des grains) sur la pression hydrostatique, mais de plus elle correspond à la donnée d'entrée des codes de physico-chimie actuels.

La figure 6.13 présente l'évolution de la pression hydrostatique moyenne dans le grain repéré en orange sur la figure 6.12² à la fin de la simulation en fonction du niveau de raffinement du

2. La même analyse a été menée sur chacun des grains du VER, avec des résultats similaires.

maillage. Il apparaît que la valeur de $\overline{P_{hyd}}^g$ s'avère assez peu dépendante au choix du maillage, les fluctuations étant typiquement de l'ordre de quelques pourcents de la valeur de référence q_3 . Comme dans le cas du comportement macroscopique, les résultats obtenus avec les maillages d'éléments linéaires semblent converger vers la valeur de référence q_3 calculée aux points de Gauss : cette tendance apparaît de façon plus nette à travers les valeurs numériques du tableau récapitulatif 6.4, présenté à la fin de cette étude.

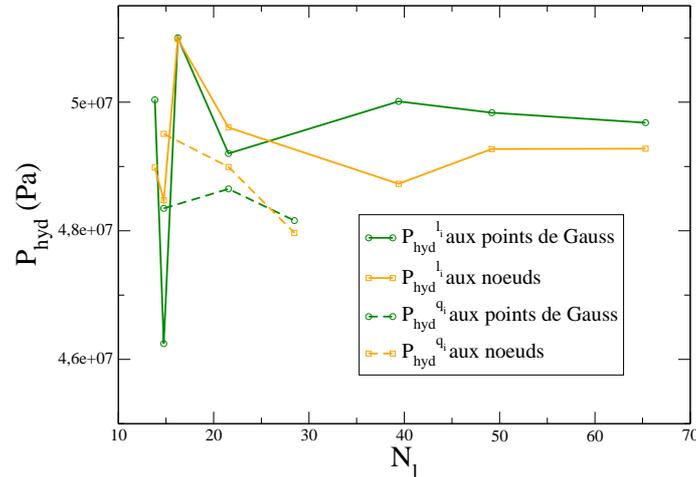


FIGURE 6.13 – Pression hydrostatique moyenne dans un grain à la fin du calcul en fonction du raffinement du maillage : champ de contraintes aux points de Gauss et extrapolé aux noeuds

Le calcul de la pression hydrostatique moyenne par grain a aussi été effectué pour le champ de contraintes extrapolé aux noeuds du maillage. L'accord avec le champ aux points de Gauss est satisfaisant et l'effet du raffinement du maillage est similaire. Ces résultats confortent a priori la validité de l'analyse du champ de contraintes aux noeuds.

En termes de distributions les écarts-type sur la pression hydrostatique moyenne par grain calculés pour les différents maillages sont aussi très proches : toutes les valeurs sont comprises dans l'intervalle [5; 7] MPa. Cette première analyse montre que, de façon générale, quelques centaines de noeuds par grains paraissent suffisantes pour estimer correctement la pression hydrostatique moyenne intragranulaire, quel que soit le type d'élément utilisé.

6.2.3.3 Ecart-type sur la pression hydrostatique intragranulaire

Il reste maintenant à analyser plus finement les effets de localisation intragranulaire. Comme au chapitre 5, l'écart-type sur la distribution de pression hydrostatique dans les grains est pris comme indicateur de cette localisation intragranulaire.

Comme le laissent entrevoir les tracés d'isovaleurs de la figure 6.12, il est difficile de mettre en évidence une convergence numérique des valeurs de $\langle P_{hyd} \rangle^g$, comme le montre la figure 6.14. Si dans le cas des éléments linéaires, la valeur de l'écart-type se stabilise pour $N_l \geq 40$, aucune corrélation n'est possible avec les résultats obtenus dans le cas des maillages d'éléments quadratiques q_i .

De la même manière, les valeurs obtenues avec les champs régularisés (moyennés par éléments ou aux noeuds) sont très inférieures à celles issues du champ de contrainte aux points de Gauss. Ceci est bien évidemment dû au fait que les différentes méthodes de régularisation tendent à lisser les fortes discontinuités du champ, comme illustré à la figure 6.12.

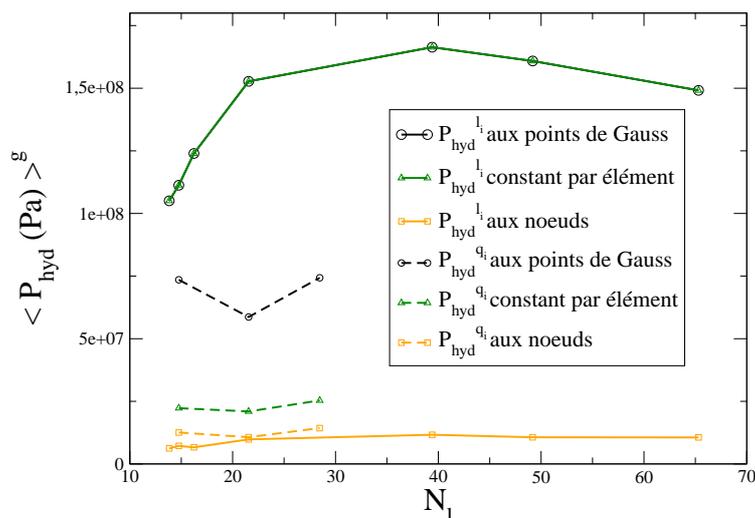


FIGURE 6.14 – Ecart-type sur la pression hydrostatique dans un grain $\langle P_{hyd} \rangle^g$ à la fin du calcul en fonction du raffinement du maillage : champ de contraintes aux points de Gauss, moyenné par élément et extrapolé aux noeuds

Les difficultés numériques rencontrées compliquent significativement l’analyse de la distribution intragranulaire de la pression hydrostatique. Le raffinement du maillage ne fait qu’accroître les effets des modes de pressions associés à l’effet checkerboard, décrit au paragraphe 6.1.3. Ces constatations sont vérifiées par les valeurs numériques présentées au tableau 6.4 : aucune convergence de $\langle P_{hyd} \rangle^g$ en fonction du raffinement du maillage n’a pu être mise en évidence.

6.2.4 Comportement aux joints de grains

Les contraintes aux joints de grains sont étudiées en reprenant les principaux aspects de la démarche développée au chapitre 5 :

- les valeurs des contraintes sont obtenues par extrapolation aux noeuds du champ de contrainte calculé aux points de Gauss ;
- les contraintes normale σ_n et tangentielle σ_t (prises en moyenne par joint de grain) sont étudiées afin d’estimer la probabilité d’apparition de glissement ou de décohésion aux joints de grains. Plus précisément, l’écart-type entre la distribution obtenue et la répartition théorique associée à un VER homogène (voir 5.2.2) permet de quantifier l’effet de l’incompatibilité intergranulaire sur le comportement des joints de grains ;
- enfin la pression hydrostatique intergranulaire P_{hyd} , qui caractérise l’évolution des cavités aux joints de grains dans les modèles de gaz, est elle aussi analysée.

Concernant le premier point, une réflexion plus détaillée concernant l’évaluation des contraintes aux joints sera présentée au chapitre 7.

6.2.4.1 Contraintes normales et tangentielles aux joints de grains

L’analyse se limite pour l’instant à l’écart-type entre la distribution réelle de contraintes aux joints de grains et la distribution “homogène”, pour laquelle on considère qu’en tout point la contrainte est égale à la contrainte macroscopique dans le VER (soit $\sigma = \Sigma$). Cet écart-type donne une première indication de l’effet de l’incompatibilité intergranulaire sur le comportement des joints de grains.

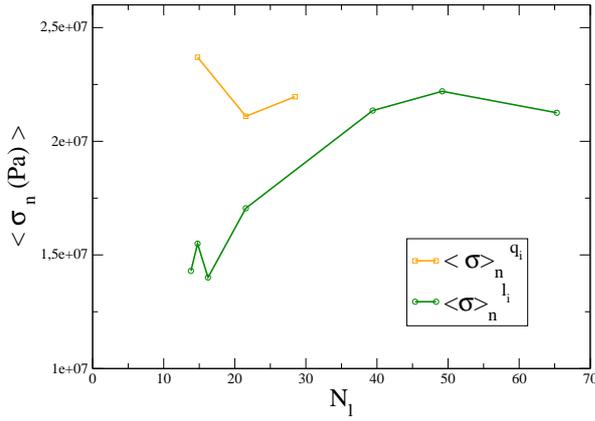


FIGURE 6.15 – Ecart-type sur la contrainte normale aux joints de grains par rapport à la valeur “homogène” à la fin du calcul en fonction du raffinement du maillage pour les éléments linéaires (courbe verte) ou quadratiques (courbe jaune)

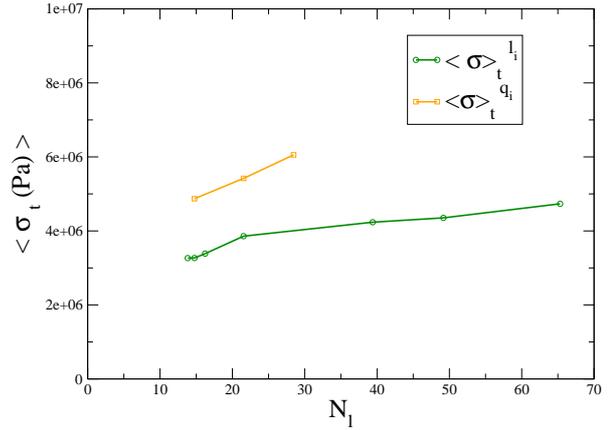


FIGURE 6.16 – Ecart-type sur la contrainte tangentielle aux joints de grains par rapport à la valeur “homogène” à la fin du calcul en fonction du raffinement du maillage pour les éléments linéaires (courbe verte) ou quadratiques (courbe jaune)

Les tendances observées lors de l’étude des distributions de pression hydrostatique intragranulaire moyenne se retrouvent dans le cas de la contrainte normale aux joints de grains : comme l’illustre la figure 6.15, les valeurs d’écart-types calculées pour les différents maillages l_i convergent vers la solution de référence issue du calcul pour les maillages d’éléments quadratiques.

En ce qui concerne les distributions de contraintes tangentielles, les valeurs d’écart-type présentées à la figure 6.16 sont significativement plus faibles (typiquement comprises dans l’intervalle [3; 7] MPa) que celles obtenues pour les contraintes normales (qui sont elles de l’ordre de 20 MPa). Le faible écart absolu entre les écart-types calculés pour les différents maillages ne permet pas de mettre en évidence une dépendance particulière de la distribution de contraintes tangentielle au type d’éléments ou au raffinement.

6.2.4.2 Pression hydrostatique

Afin de disposer d’une estimation de l’effet de l’anisotropie intragranulaire (et des phénomènes de voisinages associés) sur le comportement des joints de grains, nous calculons l’écart-type entre la distribution réelle de pression hydrostatique aux joints de grains et la valeur moyenne $\overline{P_{hyd}}$ sur l’agrégat.

Les résultats présentés à la figure 6.17 sont très similaires à ceux observés dans le cas de la contrainte normale aux joints de grains. Notons que l’hétérogénéité des contraintes générée par l’incompatibilité intergranulaire est significative, de l’ordre de 30% de la pression effective dans le VER. Une nouvelle fois, la convergence des résultats obtenus pour les différents maillages d’éléments linéaires l_i vers la solution de référence q_3 (qui apparaitrait clairement au tableau récapitulatif 6.4) plaide pour l’utilisation d’éléments quadratiques pour la modélisation du polycristal.

6.3 Conclusions de l’étude de sensibilité

Les résultats de cette étude de sensibilité sont résumés sous forme numérique au tableau 6.4. Plusieurs conclusions apparaissent au terme de ce chapitre.

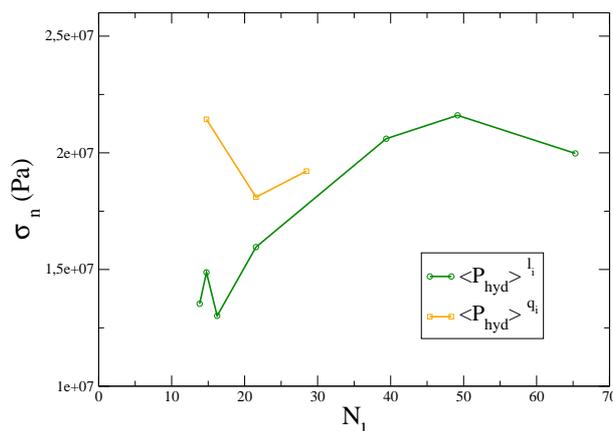


FIGURE 6.17 – Ecart-type sur la pression hydrostatique aux joints de grains à la fin du calcul en fonction du raffinement du maillage

Le comportement effectif du VER est peu sensible au choix du maillage. Bien que le comportement des éléments linéaires soit trop raide, les écarts observés sont relativement faibles (de l'ordre de quelques pourcents) notamment en ce qui concerne la contrainte axiale. Ce résultat avait déjà été observé par [Barbe 01] et était donc attendu.

Du point de vue des distributions locales de contraintes, l'utilisation de maillages d'éléments linéaires de plus en plus raffinés permet de se rapprocher des résultats obtenus pour les maillages d'éléments quadratiques. Cette tendance est particulièrement nette pour la pression hydrostatique moyenne par grain et par joint de grain, ainsi que pour la contrainte normale aux joints de grains. Les éléments quadratiques semblent donc les mieux adaptés pour la modélisation du comportement de l'agrégat, puisqu'ils permettent d'obtenir des résultats similaires à ceux obtenus avec des éléments linéaires même avec un raffinement tel que le nombre de degrés de liberté soit plus réduit. De ce point de vue, les conclusions de cette étude confirment celles du paragraphe 6.1 concernant la modélisation de la plasticité incompressible dans le cadre de la méthode des éléments finis.

L'analyse des phénomènes de localisation fins, tels que les gradients de contraintes intra-granulaires, est en revanche compliquée par l'existence de modes de pression associés à l'effet checkerboard, comme le montrent les valeurs d'écart-type de pression hydrostatique par grain présentées au tableau 6.4. Cet effet, directement issu de la formulation des éléments finis, est accentué par le raffinement du maillage.

Afin de consolider les conclusions de cette étude, il serait nécessaire de l'étendre à d'autres VER et d'autres situations de chargement. La confirmation des tendances observées passe aussi par l'exploration du comportement de maillages d'éléments quadratiques plus fins, dans l'idéal jusqu'à atteindre les mêmes niveaux de raffinement (en termes de nombre d'éléments) que ceux des maillages linéaires. Ce point est d'autant plus important que les résultats issus de la simulation sur le maillage q_3 ont été pris comme référence de l'étude.

En ce qui concerne l'étude des distributions de contraintes aux joints de grains, il faut garder à l'esprit que les champs de contraintes analysés ont été obtenus par extrapolation du champ de contraintes initial aux noeuds du maillage. La validité de cette méthode d'extrapolation pour la détermination des contraintes interfaciales doit encore être discutée.

Le chapitre suivant est donc consacré à la présentation et à l'étude de différentes méthodes envisagées pour le calcul des contraintes aux joints de grains. La qualité du champ de contraintes

interfaciales est analysée en fonction de sa capacité à vérifier la loi de comportement du matériau d'une part, et l'équilibre mécanique (sous forme intégrale) d'autre part.

Grandeur	Expression calculée	Résultats									
		l_1	l_2	l_3	l_4	l_5	l_6	l_7	q_1	q_2	
Référence	identifiant										
	nombre de noeuds ^g	49	62	87	203	1130	2137	4859	395	1395	
	$L = \sqrt[3]{\frac{V_{VER}}{V_{el}}}$	13.8	14.8	16.2	21.6	39.4	49.2	65.3	14.8	21.6	
Σ_{zz}	$\max_t \left(\frac{ \Sigma_{zz}^i - \Sigma_{zz}^q }{ \Sigma_{zz}^q } \right)$ (%)	8,26	8,00	7,40	5,86	4,87	4,29	3,46	1,60	0,93	
$\overline{P_{hyd}^g}$	$\max_g \left(\frac{ \overline{P_{hyd}^i} - \overline{P_{hyd}^q} }{ \overline{P_{hyd}^q} } \right)$ (%)	36,54	31,07	21,75	29,11	25,04	15,69	11,50	5,61	2,88	
	$\frac{ \overline{P_{hyd}^i} - \overline{P_{hyd}^q} }{ \overline{P_{hyd}^q} }$ (%)	9,57	10,50	8,83	9,32	7,41	5,74	4,49	2,31	0,81	
$\langle P_{hyd} \rangle^g$	$\max_g \left(\frac{ \langle P_{hyd}^i \rangle^g - \langle P_{hyd}^q \rangle^g }{ \langle P_{hyd}^q \rangle^g } \right)$ (%)	127,25	140,22	138,05	213,77	234,87	228,61	207,53	68,08	25,49	
	$\frac{ \langle P_{hyd}^i \rangle^g - \langle P_{hyd}^q \rangle^g }{ \langle P_{hyd}^q \rangle^g }$ (%)	63,29	73,70	101,84	150,85	188,71	179,56	159,45	37,83	15,37	
$\langle P_{hyd} \rangle^{JdG*}$	$\frac{ \langle P_{hyd}^i \rangle^{JdG} - \langle P_{hyd}^q \rangle^{JdG} }{ \langle P_{hyd}^q \rangle^{JdG} }$ (%)	29,57	22,61	32,27	16,93	7,23	12,44	3,94	11,54	5,57	
σ_n^{JdG*}	$\frac{ \langle \sigma_n^i \rangle^{JdG} - \langle \sigma_n^q \rangle^{JdG} }{ \langle \sigma_n^q \rangle^{JdG} }$ (%)	34,90	29,45	36,22	22,35	2,78	1,03	3,21	8,07	3,71	
σ_t^{JdG*}	$\frac{ \langle \sigma_t^i \rangle^{JdG} - \langle \sigma_t^q \rangle^{JdG} }{ \langle \sigma_t^q \rangle^{JdG} }$ (%)	46,07	46,01	44,08	36,27	30,03	28,10	21,84	19,51	10,42	

TABLE 6.4 – Récapitulatif de l'étude de sensibilité : erreur relative au résultat de référence q_3

* Ecart-type sur la distribution des contraintes moyennes par rapport à la valeur obtenue pour le polycristal "homogène".

Chapitre 7

Calcul des contraintes intergranulaires

L'approche polycristalline présentée dans cette thèse permet notamment d'analyser le comportement des joints de grains, lesquels jouent un double rôle d'une part en tant que canaux de diffusion pour le relâchement produits de fission gazeux et d'autre part en contribuant à la déformation du combustible par glissement et décohésion.

Pour caractériser ces phénomènes il est nécessaire de traiter le champ de contraintes issu du calcul par éléments finis (et déterminé aux points de Gauss du maillage) afin d'aboutir à une estimation correcte des contraintes à l'interface des grains. Plusieurs méthodes ont été envisagées pour parvenir à ce résultat :

- extrapoler directement le champ de contraintes des points de Gauss vers les noeuds du maillage par une méthode des moindres carrés ;
- recalculer le champ de contraintes à partir des déformations des joints de grains, elles-mêmes obtenues à partir des fonctions de forme de l'élément ;
- introduire des éléments cohésifs infiniment rigides à l'interface entre les grains.
- Calculer le champ de vecteurs contraintes obtenu par résolution de l'équilibre mécanique sur un sous-domaine associé au problème initial.

Ces différentes méthodes seront successivement décrites au cours de ce chapitre et leurs résultats comparés. L'objectif est d'aboutir à une estimation satisfaisante de la contrainte aux joints de grains et de quantifier l'erreur induite par le post-traitement

Sommaire

7.1	Positionnement du problème	150
7.1.1	Introduction	150
7.1.2	Présentation de l'étude	150
7.2	Méthodes de calcul des contraintes intergranulaires	151
7.2.1	Extrapolation des contraintes aux noeuds	152
7.2.2	Une méthode alternative de calcul des contraintes interfaciales	153
7.2.3	Utilisation d'éléments cohésifs	154
7.2.4	Analyse de la contrainte aux joints de grains par les différentes méthodes	157
7.2.5	Une quatrième méthode de calcul des contraintes interfaciales	160
7.3	Bilan de l'étude : comparaison entre les différentes méthodes	163

7.1 Positionnement du problème

7.1.1 Introduction

L'étude menée dans ce chapitre a été motivée par deux constats issus des résultats présentés dans les chapitres précédents :

- tout d'abord, le comportement des joints de grains jouent un rôle significatif dans la réponse globale du combustible. Ce point particulier a déjà été largement abordé, notamment au chapitre 5. En fait l'un des atouts majeurs de l'approche polycristalline développée ici est justement de pouvoir prendre en compte la spécificité des joints de grains dans le comportement de l' UO_2 ;
- le calcul des contraintes interfaciales pose toutefois problème dans le cadre de la méthode des éléments finis pour laquelle la contrainte n'est connue avec précision qu'aux points d'intégration du maillage.

Il convient maintenant de revenir plus en détail sur ce deuxième point. Rappelons que dans la méthode des éléments finis, le calcul des intégrales issues du principe des travaux virtuels est approché par une formule de quadrature de Gauss sous la forme (7.1) :

$$\int_V f(x) dV \simeq \sum_{i=1}^{N_g} w_i f(p_i) \quad (7.1)$$

avec (p_i, w_i) respectivement le i^{eme} point d'intégration et le poids qui lui est associé. Par conséquent, la loi de comportement du matériau n'est vérifiée que pour ces points d'intégration, et la valeur du champ de contraintes hors ces points n'est pas connue a priori.

Différentes façons de calculer les contraintes à l'interface entre deux éléments seront décrites dans les paragraphes suivants. La qualité des champs obtenus par ces méthodes réside dans leur capacité à satisfaire conjointement la loi de comportement du matériau et l'équilibre entre les contraintes internes et les efforts externes appliqués à l'élément.

7.1.2 Présentation de l'étude

Afin de comparer les résultats obtenus par les différentes méthodes pour déterminer les distributions de contraintes aux joints de grains, une nouvelle simulation d'un essai de compression sur un agrégat d' UO_2 est menée. Le but est de se placer dans des conditions similaires à celles du calcul présenté au chapitre 5 afin de valider les différentes approches dans le domaine d'utilisation effectif du modèle polycristallin.

Ce paragraphe reprend les principales données pour la simulation, du point de vue de la sollicitation imposée mais aussi en ce qui concerne le VER utilisé. Quelques précisions supplémentaires sont données quant aux grandeurs analysées pour l'étude de la distribution de contraintes aux joints de grains.

7.1.2.1 Cadre de la simulation

De la même manière que pour le chapitre 5 une sollicitation de type essai d'écrasement est appliquée à l'agrégat. Les données du chargement, inspirées d'essais expérimentaux menés sur le combustible vierge, sont présentées au tableau 7.1.

La géométrie retenue pour le VER est la même qu'au chapitre 6 : il s'agit d'un agrégat à 10 grains orientés aléatoirement (les orientations, cette fois, sont tirées avec une densité de probabilité uniforme). Afin d'analyser la convergence des résultats obtenus par les différentes méthodes en

	Durée de l'essai (s)	Vitesse de déformation (s^{-1})	Température ($^{\circ}C$)
Valeur	500	-2.452e-5	1118

TABLE 7.1 – Paramètres du chargement thermo-mécanique

fonction du raffinement du maillage, plusieurs niveaux de raffinement seront utilisés, comme décrit ultérieurement.

La loi de comportement intragranulaire retenue est la loi PC_U , de la même manière qu'au chapitre précédent.

7.1.2.2 Analyse du comportement des joints de grains

Afin d'analyser plus simplement les résultats obtenus par les différentes méthodes, l'étude a été limitée à 3 joints de grains dont les orientations par rapport à l'axe de sollicitation ont été jugées représentatives de l'ensemble des joints de grains. Rappelons en effet que dans le cas d'un essai de compression pure dans la direction (O_z), les contraintes normale et tangentielle aux joints de grains (telles que définies aux équations (5.5) et (5.6)) sont directement déterminées par le produit scalaire $n.(O_z)$ en l'absence d'incompatibilité intergranulaire. L'orientation des joints analysée est donnée au tableau 7.1.

Joint de grain N°	$n.(O_z)$
1	4.83888E-10
2	0.503
3	0.711

FIGURE 7.1 – Orientations des joints de grains

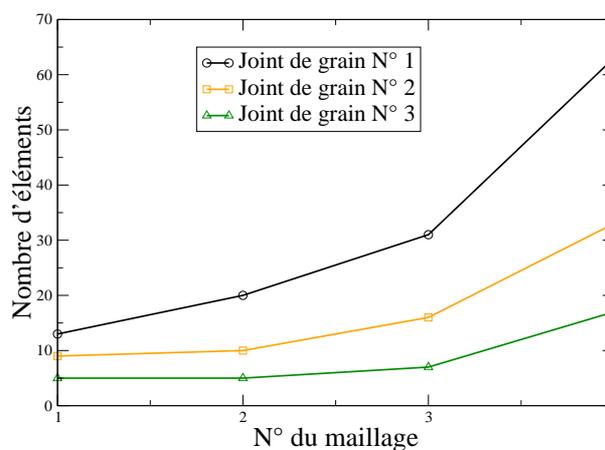


FIGURE 7.2 – Nombre d'éléments par joint de grain en fonction du N° du maillage

Comme mentionné précédemment plusieurs raffinements de maillage ont été utilisés afin d'estimer la dépendance des différentes méthodes à ce paramètre. Toutefois il convient de signaler que pour une densité de maillage globale donnée sur tout l'agrégat il est difficile de contrôler le nombre d'éléments pour chaque joint de grain. La figure 7.2 présente les différents niveaux de raffinements retenus pour l'étude.

7.2 Méthodes de calcul des contraintes intergranulaires

Il s'agit à présent de décrire en détail les différentes méthodes envisagées pour le calcul des contraintes aux joints de grains, avant de pouvoir comparer les résultats obtenus.

7.2.1 Extrapolation des contraintes aux noeuds

Les différentes analyses du comportement intergranulaire présentées dans les chapitres précédents (voir notamment le paragraphe 5.2.2) sont issues de résultats obtenus via cette première méthode d'extrapolation. Comme son nom l'indique cette méthode consiste à extrapoler les valeurs de contraintes des points d'intégration de chaque élément vers ses noeuds avant de moyenner le champ (initialement discontinu par éléments) obtenu.

7.2.1.1 Présentation de la méthode

L'extrapolation d'un champ discontinu de contraintes des points d'intégration vers les noeuds d'un élément pour l'analyse de contraintes interfaciales dans le cadre des éléments finis a fait l'objet de nombreuses études (voir notamment [Hinton 74]). Une des premières difficultés réside dans le fait que dans le cas des éléments classiques le nombre de noeuds étant supérieur au nombre de points de Gauss, une information doit être "créée" pour réaliser cette transformation.

La méthode retenue ici pour l'extrapolation et implémentée dans CAST3M fait appel à la méthode des moindres carrés et aux fonctions de forme de l'élément. En effet pour que le champ extrapolé $g(\xi, \eta)$ soit représentatif du champ de contraintes aux points de Gauss $\sigma(\xi, \eta)$ il faut minimiser en tout point de l'élément (ξ, η) une fonction erreur de la forme [Chen 95] :

$$e(\xi, \eta) = \sigma(\xi, \eta) - g(\xi, \eta) \quad (7.2)$$

En faisant appel à une formulation des moindres carrés et en écrivant le champ extrapolé à l'aide des fonctions de forme de l'élément, il vient :

$$\chi = \sum_{i=1}^{N_{sp}} \left[\sigma_j(\xi_j, \eta_j) - \tilde{N}_i(\xi_j, \eta_j) \tilde{\sigma}_i \right]^2, \quad i = 1 \dots nnp \quad (7.3)$$

où :

- ▷ (nsp, nnp) sont respectivement le nombre de points de Gauss et de noeuds de l'élément ;
- ▷ $\tilde{\sigma}_i$ sont les valeurs de contraintes nodales ;
- ▷ $\tilde{N}_i(\xi_j, \eta_j)$ sont les fonctions de forme de l'élément.

Pour minimiser la fonctionnelle χ (7.3), on obtient par dérivation :

$$\mathbf{K} \tilde{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{F} \boldsymbol{\sigma} \quad (7.4)$$

avec $\begin{cases} \tilde{\boldsymbol{\sigma}} = [\tilde{\sigma}_i] \\ \boldsymbol{\sigma} = [\sigma_j] \end{cases}$ et $\begin{cases} K_{ij} = \sum_{k=1}^{N_{sp}} \tilde{N}_i(\xi_k, \eta_k) \tilde{N}_j(\xi_k, \eta_k) \\ F_{ij} = \tilde{N}_i(\xi_j, \eta_j) \end{cases}$ respectivement.

La résolution du système (7.4) permet d'obtenir un champ de contraintes nodales construit à l'aide des fonctions de forme de l'élément et le plus représentatif possible du champ de contraintes initial.

Il faut remarquer que dans le cas d'un maillage multi-éléments il y a autant de valeurs de la contrainte en un noeud donné que d'éléments auquel appartient ce noeud. La méthode retenue ici pour rendre continu aux noeuds le champ de contraintes consiste en une simple moyenne arithmétique des différentes valeurs issues de l'extrapolation.

7.2.1.2 Avantages et limites de l'extrapolation

Les résultats obtenus par cette méthode d'extrapolation ont déjà été brièvement commentés au paragraphe 6.2.3.3. En particulier la figure 6.14 met en évidence l'effet de régularisation du champ de contraintes.

Notons toutefois que, dans le cas d'un calcul sur le VER polycristallin tel que celui décrit au paragraphe D, le calcul de la contrainte effective $\sigma_{zz}(t = 500s)$ sur l'agrégat à partir du champ de contraintes extrapolé aux noeuds donne une valeur très proche (l'erreur relative est inférieure à 0.1%) de celle issue de l'intégration du champ de contraintes initial défini aux points d'intégration. Ce résultat permet de s'assurer de la validité du champ de contraintes extrapolé au moins en termes de comportement effectif.

Cette méthode présente toutefois deux faiblesses principales. Tout d'abord, la nécessité de générer de l'information pour extrapoler les contraintes, le nombre de données (contraintes aux points de Gauss) étant inférieur au nombre d'inconnues (nombre de noeuds). Cette difficulté a été traitée par une méthode des moindres carrés présentée au paragraphe précédent. Par ailleurs il convient aussi de mentionner l'hypothèse qui consiste à écrire le champ de contraintes extrapolées comme une combinaison linéaire des fonctions de forme de l'élément. Rien n'assure que cette approximation nodale soit valable pour les contraintes.

Ce dernier point, en particulier, signifie que les contraintes obtenues ne vérifient à priori ni l'équilibre mécanique de l'élément (même sous forme faible) ni la loi de comportement. Pour cette raison une seconde méthode a été envisagée pour le calcul des contraintes aux joints de grains.

7.2.2 Une méthode alternative de calcul des contraintes interfaciales

7.2.2.1 Motivation

Une deuxième méthode a été développée pour palier aux limites de l'extrapolation directe du champ de contraintes. Il s'agit de déterminer les contraintes interfaciales en faisant le minimum d'hypothèses sur la forme a priori du champ de contraintes.

Rappelons tout d'abord que pour un élément classique le champ de déplacement peut s'écrire en tout point \mathbf{X} de l'élément :

$$\mathbf{U}(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^{N_{np}} \tilde{\mathbf{U}}^k \tilde{N}^k(\mathbf{X}) \quad (7.5)$$

avec les mêmes notations qu'au paragraphe précédent. On en déduit :

$$\varepsilon_{ij}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U_i}{\partial X_j}(\mathbf{X}) + \frac{\partial U_j}{\partial X_i}(\mathbf{X}) \right) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{N_{np}} \left[u_i^k \frac{\partial \tilde{N}^k}{\partial X_j} + u_j^k \frac{\partial \tilde{N}^k}{\partial X_i} \right] \quad (7.6)$$

Il est donc possible de déterminer la déformation $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{X})$ en n'importe quel point de l'élément, puis, par intégration de la loi de comportement $\boldsymbol{\sigma} = f(\boldsymbol{\varepsilon})$ de remonter à la valeur de la contrainte. A noter que dans ce cas il a seulement été fait appel à l'approximation des fonctions de formes des déplacements et qu'aucune hypothèse supplémentaire n'a été introduite.

7.2.2.2 Mise en place de la procédure

La méthode retenue pour le calcul de la contrainte interfaciale se présente donc selon cette succession d'étapes (voir figure 7.3) :

- déterminer le (ou les) point(s) de l'interface où seront déterminées les contraintes. Dans notre cas c'est le barycentre de chaque triangle (t_1) appartenant à un joint de grain qui a été retenu¹ :
- calculer l'historique de déformation en ce(s) point(s) avec l'équation (7.6). En fait pour chaque point il faut prendre en compte une évolution $\varepsilon(t)$ pour chaque élément volumique (deux tétraèdres tet_1 et tet_2 dans notre cas) auquel appartient le point considéré.
- réintégrer la loi de comportement pour chacun des $\varepsilon(t)$ obtenu et déterminer le tenseur de contraintes correspondant.
- moyenner les tenseurs de contraintes $\sigma^i(\mathbf{X})$ obtenus, de façon à obtenir une valeur unique de la contrainte au point considéré.

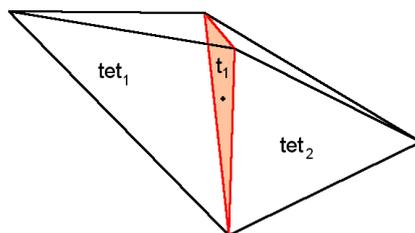


FIGURE 7.3 – Calcul des contraintes interfaciales par réintégration de la loi de comportement : éléments du calcul

Concernant cette dernière étape il faut effectuer une moyenne sur deux valeurs de la contrainte (une par tétraèdre appuyé sur le triangle considéré). Pour plus de rigueur cette moyenne a été calculée en prenant en compte une pondération associée au volume de chacun des tétraèdres v_1 et v_2 :

$$\sigma(\mathbf{X}) = \left(\frac{1}{V_1} \sigma^1(\mathbf{X}) + \frac{1}{V_2} \sigma^2(\mathbf{X}) \right) \frac{V_1 V_2}{(V_1 + V_2)} \quad (7.7)$$

Ce qui implique que plus un élément est de taille importante (et donc l'interpolation potentiellement moins satisfaisante) moins il impactera la valeur de contrainte calculée.

Un des principaux désavantages de cette méthode est le coût en temps de calcul de l'intégration de la loi de comportement sur tous les points associés aux triangles t_i du joint de grain. Par ailleurs, l'étape de moyenne nécessaire pour rendre continu le champ de contraintes interfaciales reste une hypothèse forte qui limite la validité de cette méthode.

Afin de résoudre ces difficultés, une troisième alternative va maintenant être présentée : l'utilisation d'éléments cohésifs, tels que décrits initialement au paragraphe 4.4.2.

7.2.3 Utilisation d'éléments cohésifs

Les zones cohésives ont été présentées au chapitre 4 pour la modélisation de la décohésion aux joints de grains. De façon plus générale, elles sont particulièrement adaptées à l'étude de phénomènes d'interfaces et permettent d'accéder à une estimation plus précise des contraintes aux joints que les méthodes présentées précédemment.

1. Ce choix semble particulièrement approprié dans le cas d'un maillage d'éléments linéaires. Dans le cas d'une interpolation quadratique, il faudrait en toute rigueur choisir un nombre de points égal au nombre de points d'intégration du triangle à six noeuds.

En effet, la loi de comportement $\mathbf{T}(\mathbf{u})$ entre les tractions et le saut de déplacement à l'interface est directement exprimée aux points de Gauss de l'élément cohésif, comme illustré à la figure 7.4. Ceci nous donne accès directement aux contraintes normales aux joints de grains sans manipulation du champ de contraintes à posteriori du calcul.

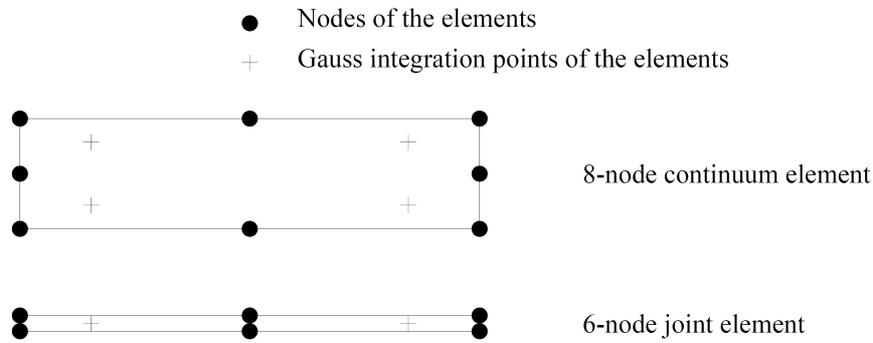


FIGURE 7.4 – Dégénération d'un élément de volume en élément joint [Pegon 00]

En associant aux éléments cohésifs un comportement élastique suffisamment rigide pour ne pas modifier le comportement du VER, nous pouvons donc déterminer les contraintes interfaciales compatibles avec la loi de comportement des grains et avec l'équilibre mécanique local. Toutefois, comme nous allons le voir maintenant, cette notion de rigidité infinie ne va pas sans poser problème dans la pratique.

7.2.3.1 Rigidité parasite

Même dans l'hypothèse de zones cohésives non endommageables, l'introduction d'éléments cohésifs aux joints de grains perturbe la rigidité du VER. Cette perturbation, qui est d'autant plus importante que le nombre d'éléments cohésifs dans la structure est grand, est donc directement dépendante du raffinement du maillage. Un critère a été proposé dans [Perales 07] afin d'assurer que la modification de la raideur apparente induite par la présence de zones cohésive reste négligeable. Ce critère se met sous la forme :

$$K_n \geq \frac{21E}{L_{mesh}} \quad (7.8)$$

avec :

- ▷ K_n la raideur élastique des éléments cohésifs ;
- ▷ E le module d'Young du modèle volumique (ici les grains) ;
- ▷ L_{mesh} une dimension caractéristique du maillage.

Ce critère sera vérifié pour toutes les simulations faisant intervenir des éléments cohésifs présentées par la suite. Le paragraphe qui suit va permettre de valider la mise en oeuvre de zones cohésives rigides en s'assurant qu'elles ne modifient pas la réponse du VER.

7.2.3.2 Validation de la mise en oeuvre de zones cohésives rigides

Un premier calcul en compression uniaxiale dans la direction (O_z) est mené sur le VER en présence d'éléments cohésifs rigides (tels que $K_n \geq K_n^0 = \frac{21E}{L_{mesh}}$).

Au cours de cette étape de validation, le comportement des grains est élastique cubique (voir le paragraphe 4.1) et tous les grains ont la même orientation cristalline. De fait, le comportement

du polycristal est homogène et les champs de contraintes et déformations sont uniformes dans tout le VER.

Ce premier calcul nous permet de comparer la valeur de contrainte effective analytique Σ^{al} et celle obtenue par la simulation Σ^{sim} . L'erreur relative calculée est égale à $\frac{|\Sigma^{al}-\Sigma^{sim}|}{\Sigma^{al}} \simeq 1.e-6$ montre que l'influence des éléments cohésifs sur le comportement effectif du VER est négligeable. D'autres simulations, en prenant en compte le fluage intragranulaire, sont présentées en annexe D et confirment ce résultat.

Pour autant, cette validation au niveau macroscopique n'est pas suffisante puisqu'il convient de s'assurer que la contrainte aux joints de grains est elle aussi correctement estimée. Dans le cas d'une sollicitation de compression uniaxiale sur un VER homogène, nous avons rappelé au paragraphe 5.2.2 que la contrainte normale aux joints de grains peut s'écrire directement en fonction de l'orientation du joint et de la contrainte macroscopique :

$$\sigma_n^i = n_z^i{}^2 \Sigma_{zz} \quad (7.9)$$

avec :

- ▷ σ_n^i la contrainte normale au joint de grain (i) ;
- ▷ $n_z^i = n^i \cdot (O_z)$ produit scalaire entre la normale n^i du joint de grain et l'axe de compression ;
- ▷ Σ_{zz} la contrainte axiale effective dans le VER.

Cette valeur analytique nous offre un point de comparaison avec les résultats de la simulation. La figure 7.5 présente la distribution de contrainte normale moyenne par joint de grain obtenue après une simulation avec $K_n = 1.68e20Pa \simeq 38K_n^0$ en fonction de l'orientation du joint de grain, comparée avec la distribution issue de l'équation (7.9). Bien que l'allure de la courbe soit conservée, il apparaît que la valeur de contrainte normale calculée n'est pas rigoureusement exacte : l'erreur relative² ϵ peut atteindre jusqu'à 15% de la valeur attendue.

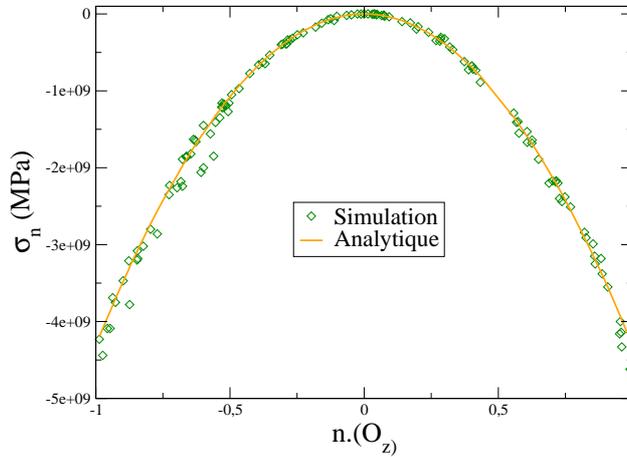


FIGURE 7.5 – Erreur sur la contrainte normale moyenne par joint de grain : comparaison entre la valeur analytique et les résultats de simulation. Distribution de contraintes en fonction de l'orientation du joint, calcul pour $K_n = 1.68e20Pa$

Nous nous proposons d'effectuer une étude de sensibilité de l'erreur commise ϵ en fonction de la raideur élastique K_n retenue pour les zones cohésives. La figure 7.6 présente les valeurs moyenne et maximale de ϵ en fonction du rapport $\frac{K_n}{K_n^0} = \frac{K_n L_{mesh}}{21E}$.

2. afin d'éviter les singularités au voisinage de $n_z = 0$, l'erreur sur la contrainte normale au joint de grain (i) est définie sous la forme $\epsilon^i = \frac{|n_z^i{}^2 \Sigma_{zz} - \sigma_n^i|}{\Sigma_{zz}}$

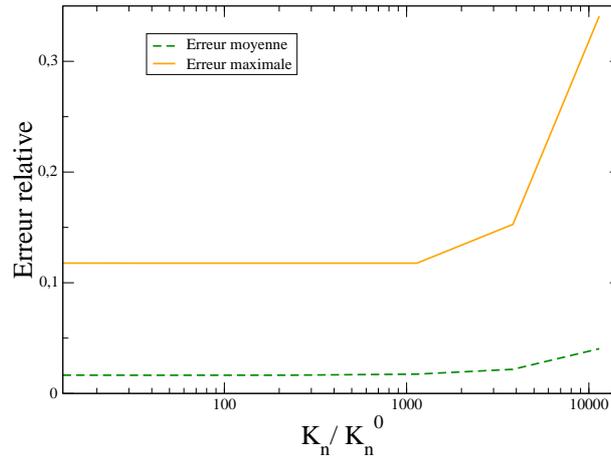


FIGURE 7.6 – Erreur sur la contrainte normale moyenne par joint de grain : comparaison entre la valeur analytique et les résultats de simulation pour différentes valeurs de raideur élastique. Ecart moyen (courbe verte) et écart maximal (courbe orange).

De façon surprenante l’erreur commise sur la distribution de contraintes normales tend à augmenter pour les très fortes valeurs de raideurs élastiques. Ceci pourrait s’expliquer par les difficultés numériques liées au mauvais conditionnement de la matrice de raideur du système. Etant donné les très grandes valeurs numériques mises en jeu (jusqu’à $5.e22Pa.m^{-1}$), la seule précision machine peut s’avérer à elle seule responsable des problèmes rencontrés.

Par ailleurs, il apparaît que bien que l’erreur relative moyenne sur l’ensemble des joints de grains reste faible ($\leq 5\%$) quelle que soit la valeur de K_n retenue, sa valeur maximale est quant à elle comprise entre 10% et 35%. Cette conclusion affaiblit l’intérêt que présentent les éléments cohésifs pour l’estimation des contraintes aux joints de grains. Soulignons par contre qu’il n’y a aucune raison pour que cette erreur soit plus importante dans le cas de champ de contraintes non-uniformes (pour un VER dont les grains ont des orientations différentes) auquel nous nous intéresserons par la suite.

Les différentes méthodes de calcul de contraintes interfaciales ayant maintenant été présentées, nous allons à présent les mettre en oeuvre dans le cadre d’un calcul d’agrégat similaire à celui décrit au chapitre 5.

7.2.4 Analyse de la contrainte aux joints de grains par les différentes méthodes

Nous présentons dans ce paragraphe les résultats obtenus via les différentes méthodes de calcul des contraintes aux joints présentées précédemment.

Les caractéristiques de la simulation et des joints de grains analysés ont été décrits à la section D. L’étude se limite au calcul des valeurs de contraintes normales moyennes par joint de grain, dont la définition est rappelée ici :

$$\sigma_n = \frac{1}{S_{jdg}} \int \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} \, dS \quad (7.10)$$

7.2.4.1 Maillage d’éléments linéaires

Une première série de simulation a été réalisée avec des maillages d’éléments linéaires de raffinement croissant. Ces éléments (tétraèdres à 4 noeuds) présentent l’intérêt de nous permettre de

traiter séparément les deux difficultés associées au calcul des contraintes interfaciales :

- la détermination des contraintes à l'interface d'un élément fini ;
- l'opération de "moyenne" inter-éléments, destinée à rendre continu le champ de contrainte obtenu.

Dans le cas des tétraèdres linéaires, qui ne comptent qu'un unique point d'intégration, la contrainte est constante dans l'élément. Les résultats obtenus soit par extrapolation soit par réintégration de la loi de comportement à l'interface seront donc identiques et égaux à cette valeur constante : les écarts éventuels ne proviennent que de la manière dont le champ de contraintes est lissé pour le rendre continu.

La figure 7.7 présente l'évolution des contraintes normales en fonction du nombre d'éléments dans chaque joint de grain. La comparaison entre les différentes méthodes permet de faire quelques observations :

- pour un maillage donné, les écarts relatifs entre méthodes sont significatifs (jusqu'à un facteur 2 entre les valeurs obtenues) ;
- aucune convergence claire en fonction du raffinement du maillage n'apparaît pour chacune des méthodes. Notons malgré tout que pour les zones cohésives, le comportement des joints N° 1 et 2 s'avère peu dépendant du maillage.

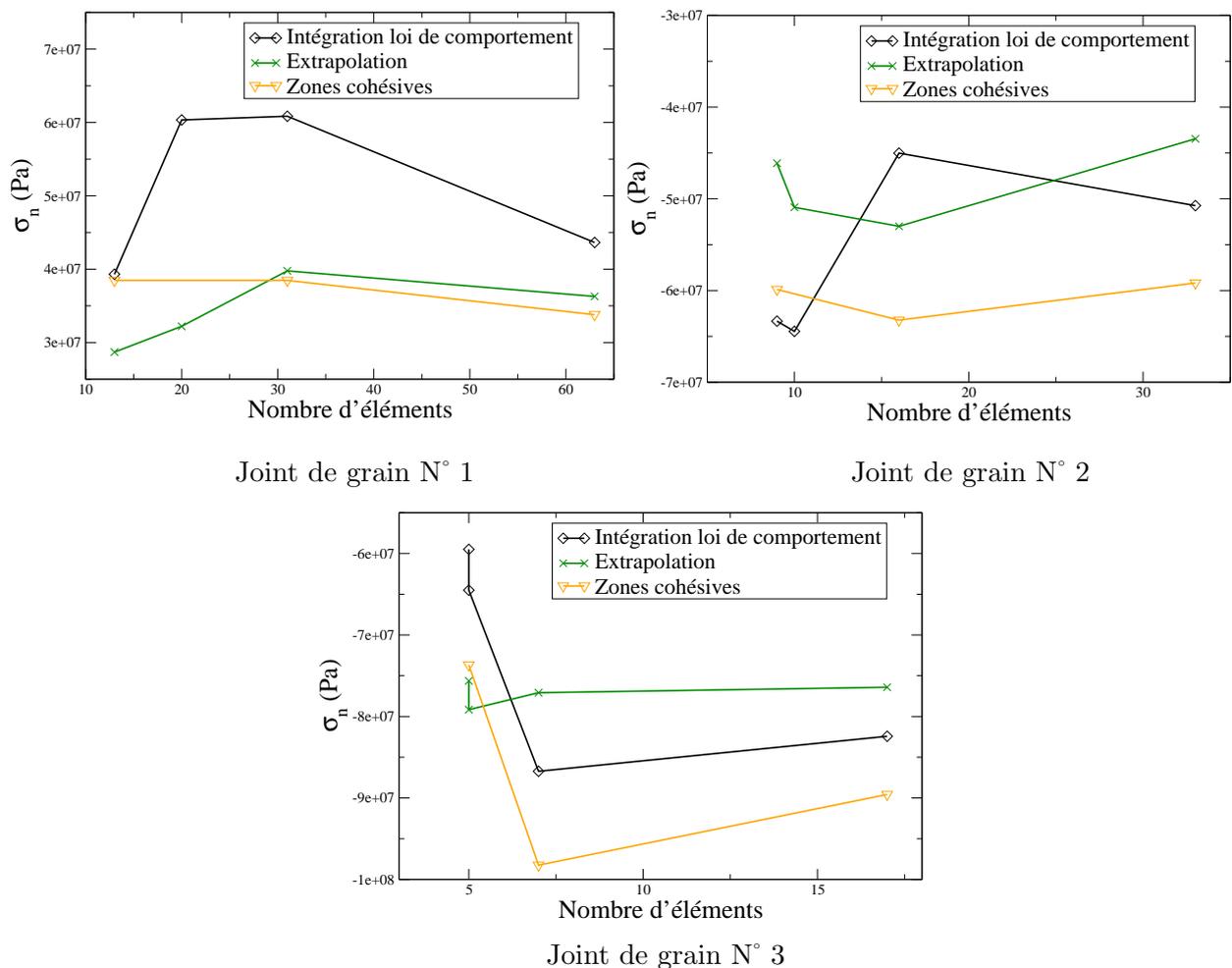


FIGURE 7.7 – Evolution de la contrainte normale en fin de simulation pour les différents joints de grains en fonction du raffinement de maillage, cas des éléments linéaires

Les écarts observés entre les deux premières méthodes (extrapolation et intégration de la loi de comportement) s'expliquent par le fait que, pour le champ extrapolé aux noeuds, la valeur en chaque noeud est calculée à partir des contraintes dans chacun des éléments auxquels appartient ce noeud. En revanche, comme nous l'avons décrit au paragraphe 7.2.2, la contrainte interfaciale définie au barycentre d'un triangle du joint de grain pour la deuxième méthode (voir équation (7.7)) ne fait intervenir que les tétraèdres directement appuyés sur le triangle considéré.

7.2.4.2 Maillage d'éléments quadratiques

La même méthodologie est appliquée à des maillages d'éléments quadratiques. Dans ce cas, la contrainte n'étant plus constante par élément, la méthode de calcul des contraintes à la surface d'un tétraèdre (par extrapolation ou réintégration de la loi de comportement) impacte le résultat de calcul. Par ailleurs, la mise en oeuvre d'éléments cohésifs n'étant pas disponible dans CAST3M pour des éléments de volume quadratique, la comparaison se limite aux résultats obtenus par ces deux méthodes.

Les résultats présentés aux figures 7.8 et 7.9 sont au premier abord assez similaires à ceux obtenus pour les tétraèdres linéaires. En particulier, une forte dépendance au raffinement du maillage (jusqu'à un facteur deux entre les extrema de contrainte normale) est observée.

Il apparaît pourtant que la corrélation entre les deux méthodes, au moins en termes d'évolution en fonction du nombre d'éléments dans chaque joint de grain, est meilleure que précédemment. Ce résultat est plutôt étonnant dans la mesure où, contrairement au cas des éléments linéaires, les écarts entre les deux méthodes peuvent être générés non seulement lors de l'étape de "lissage" du champ de contrainte mais aussi par la technique utilisée pour le calcul des contraintes à la surface d'un élément.

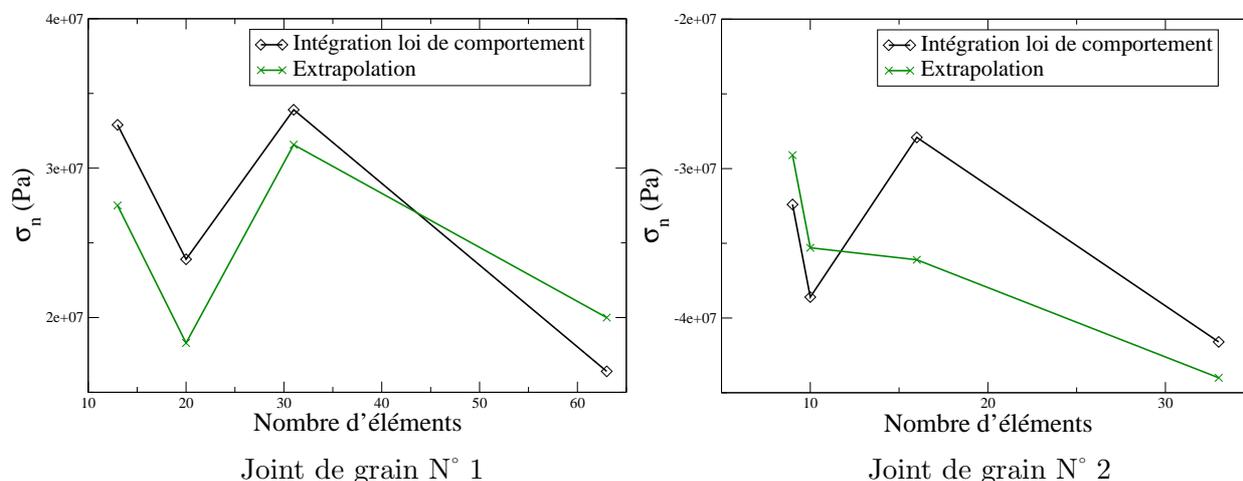


FIGURE 7.8 – Evolution de la contrainte normale en fin de simulation pour les joints de grains N° 1 et 2 en fonction du raffinement de maillage, cas des éléments quadratiques

Ce résultat peut s'expliquer par le fait qu'à nombre d'éléments égal, la description du champ de contraintes offerte par les éléments quadratiques est plus complète que celle issue des maillages d'éléments linéaires, ce qui permet d'améliorer la précision des méthodes utilisées pour le calcul des contraintes interfaciales. Ceci est particulièrement sensible dans le cas du maillage le plus raffiné, pour lequel les contraintes normales calculées sont très proches.

Notons par ailleurs que les valeurs de contraintes normales calculées pour les maillages quadratiques sont moins élevées (en valeur absolues) que celles issues des simulations réalisées avec des

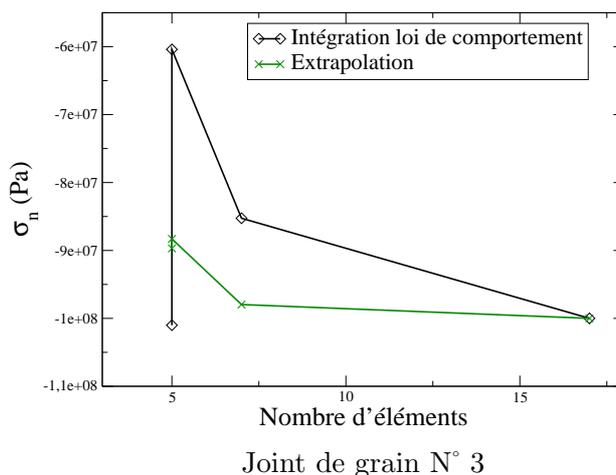


FIGURE 7.9 – Evolution de la contrainte normale en fin de simulation pour le joint de grains N ° 3 en fonction du raffinement de maillage, cas des éléments quadratiques

éléments linéaires. Une fois encore, le comportement trop raide des éléments linéaires est mis en évidence par ce résultat.

7.2.5 Une quatrième méthode de calcul des contraintes interfaciales

La principale faiblesse des méthodes d'extrapolation et de réintégration de la loi de comportement réside dans la discontinuité du champ de contrainte au passage de l'interface. Tandis que les résultats obtenus avec des éléments linéaires soulignent l'importance du choix de la technique utilisée pour rendre continu ce champ, les hypothèses envisagées dans cette étude (moyenne des contributions de tous les éléments auquel un noeud appartient dans un cas, moyenne des contributions des deux tétraèdres adossés au triangle considéré dans l'autre) sont trop limitantes pour parvenir à un résultat satisfaisant.

7.2.5.1 Présentation de la méthode

[Duvaut 82] propose une méthode différente pour le calcul des contraintes interfaciales basé sur l'écriture de l'équilibre mécanique sur un sous ensemble ω_1 d'un domaine Ω de frontière $\partial\Omega$, comme illustré à la figure 7.10.

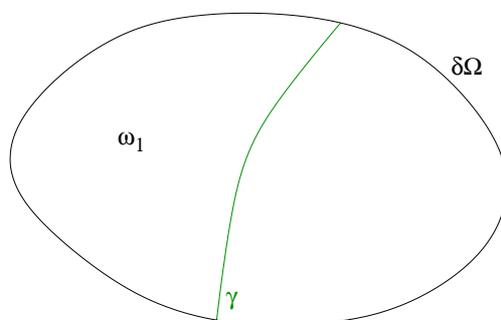


FIGURE 7.10 – Présentation schématique du problème : détermination du vecteur contrainte sur le contour γ du sous ensemble ω_1 inclus dans Ω

Décomposons la frontière $\partial\omega_1$ de ω_1 sous la forme $\partial\omega_1 = \gamma \cup (\partial\omega_1 \cap \partial\Omega)$. En l'absence de forces volumiques, la formulation faible de l'équation d'équilibre peut alors se mettre sous la forme :

$$\int_{\gamma} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{v} dS = \int_{\omega_1} \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}) dV - \int_{\partial\omega_1 \cap \partial\Omega} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{v} dS \quad (7.11)$$

avec :

- ▷ \mathbf{n} la normale unitaire sortante au domaine ω_1 ;
- ▷ \mathbf{v} une fonction test, suffisamment régulière, associée à la formulation faible.

La fonction $\mathbf{F} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}$ est alors approximée sur la base (\tilde{N}_i) des fonctions d'interpolation associées à γ avec $\mathbf{F} \simeq \mathbf{F}^h = \sum_i \tilde{N}_i \mathbf{F}^i$. L'équation (7.11) devient alors :

$$\mathbf{F}^i \cdot \int_{\gamma} \tilde{N}_i \mathbf{v} dS = \int_{\omega_1} \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}) dV - \int_{\partial\omega_1 \cap \partial\Omega} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{v} dS \quad (7.12)$$

En utilisant pour les fonctions \mathbf{v} les fonctions d'interpolation mises en oeuvre pour la détermination du champ de déplacements du problème aux éléments finis initial, nous reconnaissons dans les termes de gauche la matrice de rigidité et le second membre calculés lors de la résolution du problème initial. Les valeurs nodales (\mathbf{F}^i) du vecteur contrainte sont déterminées par résolution du système linéaire 7.12.

7.2.5.2 Mise en oeuvre dans le cas d'un VER homogène

Cette méthode a été utilisée pour le calcul des contraintes normales aux joints de grains dans le cas de la simulation d'un essai de traction uniaxiale à vitesse de déformation imposée dans la direction (O_z) sur un agrégat homogène, dont tous les grains ont la même orientation.

De la même manière que pour le calcul de validation présenté au paragraphe 7.2.3.2, la valeur obtenue pour un joint de grain de normale $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)$ est comparée à la valeur analytique $n_z^2 \Sigma_{zz}$ connue dans le cas d'un agrégat homogène, pour lequel $\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\Sigma}$.

Les sous-domaines ω_i considérés ici sont les grains eux-mêmes. Le vecteur contrainte \mathbf{F} est calculé sur toute la frontière du grain (à l'exception des parties communes avec la frontière du VER, si elles existent) conformément à la méthode décrite au paragraphe précédent.

La contrainte normale moyenne à un joint de grain de normale \mathbf{n} est ensuite définie comme l'intégrale du produit scalaire $\mathbf{F} \cdot \mathbf{n}$ sur la surface du joint de grain considéré.

Cette définition n'est toutefois pas complètement satisfaisante puisque la normale n'est pas continue aux noeuds en frontière d'un joint de grain donné. Le champ de forces nodales sur le contour du joint de grain incluant une contribution des joints de grains adjacents, la contrainte normale calculée à ces noeuds n'est pas exacte. Cet effet de bord est mis en évidence sur le tracé d'isovaleurs de la figure 7.11 : au centre du joint de grain, la valeur analytique $n_z^2 \Sigma_{zz} = 4.68 MPa$ est correctement calculée mais il existe de fortes fluctuations pour les noeuds en frontière.

Cette analyse peut-être généralisée à l'ensemble des joints de grains du VER. Il apparaît notamment que ces effets de bords sont d'autant plus prononcés que le nombre d'éléments dans le joint est faible comme le montre la figure 7.12, qui présente l'erreur relative $\frac{|n_z^2 \Sigma_{zz} - \sigma_n|}{n_z^2 \Sigma_{zz}}$ en fonction du raffinement de maillage.

Les résultats présentés à la figure 7.12 montrent par ailleurs que l'erreur relative est supérieure à 10% pour seulement un joint de grain comptant plus de 25 éléments.

Cette première simulation sur un VER homogène a mis en évidence les difficultés liées à la mise en oeuvre de cette nouvelle méthode pour la détermination des contraintes aux joints de grains.

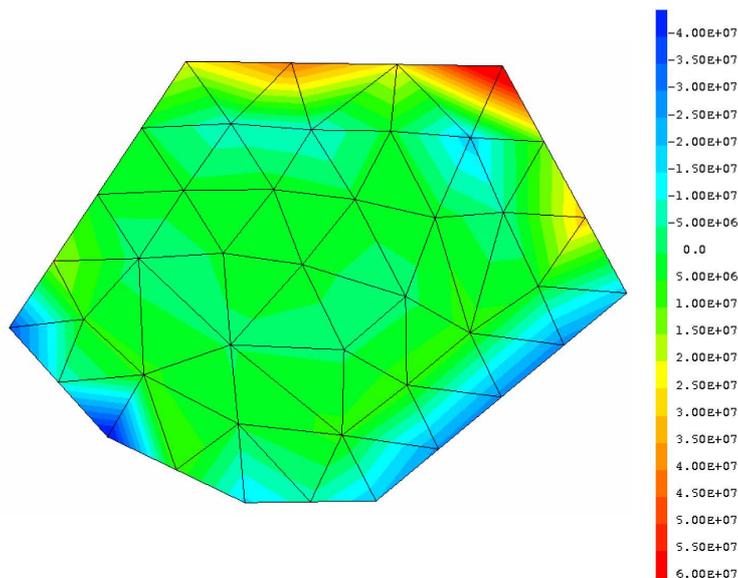


FIGURE 7.11 – Champ de contrainte normale $\mathbf{F} \cdot \mathbf{n}$ sur un joint de grain de normale $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)$ tel que $n_z^2 \Sigma_{zz} = 4.68 MPa$

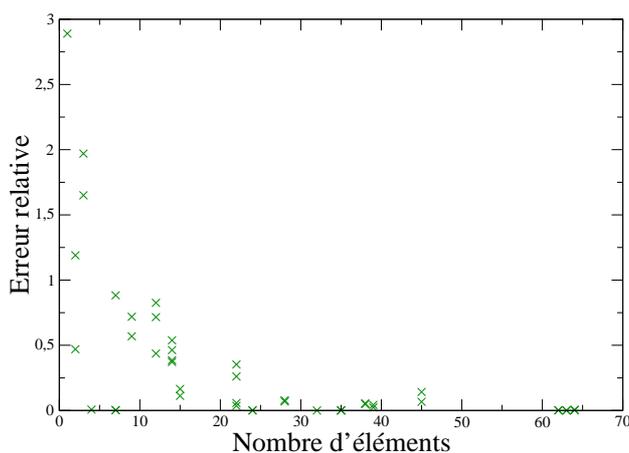


FIGURE 7.12 – Erreur relative entre contrainte normale analytique et contrainte normale calculée en fonction du nombre d'éléments dans les joints de grains

C'est principalement la discontinuité du vecteur contrainte à l'intersection de deux joints de grains qui génère une erreur sur le résultat du calcul, laquelle sera d'autant plus importante que le nombre de noeuds du maillage du joint de grain considéré sera faible.

Ce problème pourrait toutefois être résolu en utilisant pour la description du champ de vecteur contrainte une base de fonctions de formes différente de celles utilisées pour les déplacements, et permettant de décrire une discontinuité basée sur le changement de normale à l'intersection de deux joints de grains

Une étude plus complète, faisant intervenir des simulations sur des polycristaux "réels" (dont les grains ont des orientations différentes), devrait permettre d'explorer les possibilités de cette méthode de façon plus exhaustive. Faute de temps, elle n'a pu être menée dans le cadre de cette thèse.

7.3 Bilan de l'étude : comparaison entre les différentes méthodes

Le calcul de contraintes interfaciales dans le cas d'une résolution par éléments finis d'un problème mécanique est un problème ouvert qui dépasse largement le cadre de cette thèse. Les simulations présentées dans ce chapitre ont toutefois permis d'entrevoir un certain nombre de difficultés liées à ce problème. Quatre méthodes ont été envisagées pour le calcul des contraintes aux joints de grains :

- l'extrapolation du champ de contraintes solution du problème initial par une méthode des moindres carrés ;
- la réintégration de la loi de comportement, à partir du tenseur de déformation à l'interface ;
- l'utilisation d'éléments cohésifs ;
- le calcul du vecteur contraintes obtenu par résolution de l'équilibre mécanique sur un sous-domaine associé au problème initial.

La première méthode, qui est aussi la plus commune, ne permet de respecter ni la loi de comportement ni l'équilibre du vecteur contrainte inter-éléments. La seconde méthode a été développée dans l'optique de respecter la loi de comportement du matériau ; toutefois, l'étape de moyenne, qui permet de rendre continu le champ de contraintes calculée, diminue considérablement la précision des résultats obtenus. L'étude présentée dans ce chapitre montre en effet que la manière dont le champ de contraintes est lissé entraîne des fluctuations significatives (jusqu'à un facteur 2) des valeurs de contraintes calculées. Dans le cas d'éléments quadratiques, les résultats obtenus via ces deux méthodes semblent converger à condition de raffiner suffisamment le maillage.

L'utilisation de zones cohésives paraît en revanche plus prometteuse, dans la mesure où le vecteur contrainte calculé est la solution réelle du problème initial. Les simulations proposées dans ce chapitre ont mis en évidence quelques difficultés numériques liées au comportement élastique des éléments cohésifs, qui devraient être analysées avant de passer à l'exploitation de cette méthode.

Signalons encore que l'utilisation de zones cohésives est limitée par le coût de calcul associé à l'introduction d'éléments supplémentaires dans le maillage d'éléments finis initial. Cette difficulté est toutefois contrebalancée par la dépendance relativement faible des résultats obtenus (voir figure 7.7) au raffinement du maillage.

Enfin, la méthode proposée par [Duvaut 82], dont l'application au calcul des contraintes aux joints de grains n'a pas pu être étudiée de façon détaillée, donne des résultats prometteurs. La principale limitation de cette méthode est liée à un effet de bord, causé par la discontinuité de la normale au passage d'un joint de grain à l'autre, et qui peut être limité par l'utilisation de maillage plus raffinés. Pour traiter ce problème, il sera en toute rigueur nécessaire d'utiliser une base de fonctions de formes permettant de tenir compte de la discontinuité associée au changement de normale pour décrire le champ de vecteurs contrainte.

Quatrième partie

Validation du modèle d'agrégat

Chapitre 8

Décohésion intergranulaire au cours d'un essai de fluage

Ce chapitre se propose de comparer le comportement du VER polycristallin avec les observations expérimentales de décohésion effectuées par [Dherbey 00] pour des essais de fluage en compression uniaxiale.

Un premier paragraphe résume les principaux résultats expérimentaux et le principe de mesure de décohésion. Par la suite, un premier calcul est mené sans prise en compte de la décohésion afin d'analyser la réponse des grains à une sollicitation de fluage et le comportement des joints de grains en traction. Enfin, une série de calculs mettant en oeuvre le modèle de zones cohésives présenté au paragraphe 4.4 et les résultats obtenus commentés.

Sommaire

8.1	Mesures expérimentales de la décohésion	168
8.1.1	Caractérisation des essais	168
8.1.2	Mesures de décohésion intergranulaire	168
8.2	Simulation de l'essai	169
8.2.1	Un premier calcul en l'absence de décohésion	169
8.2.2	Vers la prise en compte de la décohésion intergranulaire	170
8.2.3	Résultats de la simulation	172
8.3	Conclusions	177
8.3.1	Bilan des simulations de décohésion	177
8.3.2	Perspectives pour la modélisation du comportement intergranulaire	178

8.1 Mesures expérimentales de la décohésion

8.1.1 Caractérisation des essais

Les éléments de caractérisation expérimentale sur lesquels se base ce travail sont issus des travaux de [Dherbey 00] pour la caractérisation du fluage de l'UO₂ à haute température. Il convient donc pour commencer de rappeler les conditions opératoires avant d'analyser plus en détail les résultats.

Les essais ont été réalisés sur des pastilles d'UO₂ polycristallin identiques à celles utilisées dans les REP. Plusieurs mesures ont été effectuées pour des tailles de grains standards (9 et 10 μm) et plus importantes (27 et 36 μm). Il s'agit d'essais de compression uniaxiale à contrainte imposée¹ $\sigma \in [20; 60]$ MPa. Les niveaux de déformation axiale atteints sont typiquement de l'ordre de la dizaine de pourcents ($\varepsilon(t = t_{fin}) \in [5.9; 16.4]$ %).

Enfin pour tous ces essais la température a été imposée constante à 1465°C. Les caractéristiques des sollicitations correspondent à celles rencontrées par le combustible pendant l'irradiation.

Le paragraphe suivant sera l'occasion de nous pencher sur l'analyse de ces résultats expérimentaux pour l'estimation de la décohésion intergranulaire.

8.1.2 Mesures de décohésion intergranulaire

8.1.2.1 Microstructure du combustible déformé

L'analyse des échantillons déformés au microscope optique met en évidence l'inhomogénéité de la déformation. En particulier des cavités ou des décohésions intergranulaires sont observées pour les joints de grains orientés parallèlement à l'axe de compression, principalement dans la zone centrale de la pastille.

Comme nous l'avons vu au chapitre 4, l'ouverture des joints de grains est pilotée par la cavitation dans le domaine des basses contraintes ($\sigma \sim 30$ MPa) tandis qu'à plus hautes contraintes ($\sigma > 40$ MPa) c'est la fissuration des joints qui contrôle l'endommagement, comme illustré à la figure 8.1.

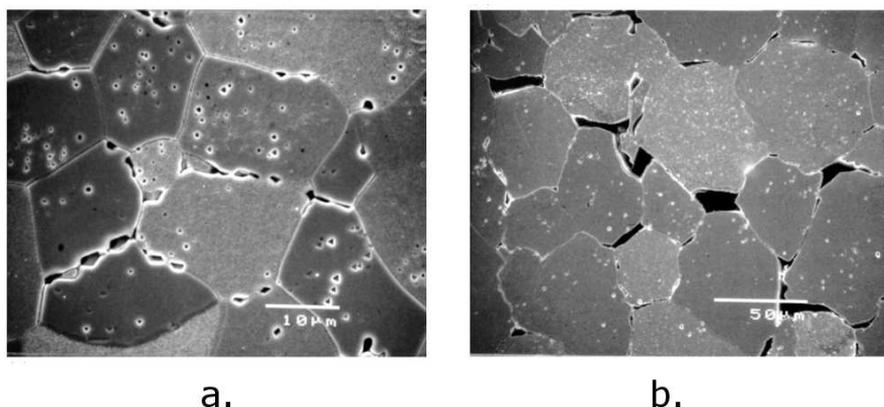


FIGURE 8.1 – Micrographies de pastilles d'UO₂ en compression : mécanismes de cavitation ($\sigma = 25$ MPa) (a.) et de fissuration intergranulaire ($\sigma = 50$ MPa) (b.) [Dherbey 02]

1. Des essais à vitesse de déformation imposée ont aussi été menés, mais nous ne les aborderons pas dans le cadre de cette étude.

8.1.2.2 Principe de mesure de la décohésion

Afin de quantifier les phénomènes de décohésion, [Dherbey 00] a développé une méthode de mesure du glissement aux joints de grains non accommodé par des mesures optiques. La déformation associée à la décohésion est prise comme la valeur moyenne des sommes d'ouvertures par ligne d'intercept (voir figure 8.2) ramenée à la taille de l'image.

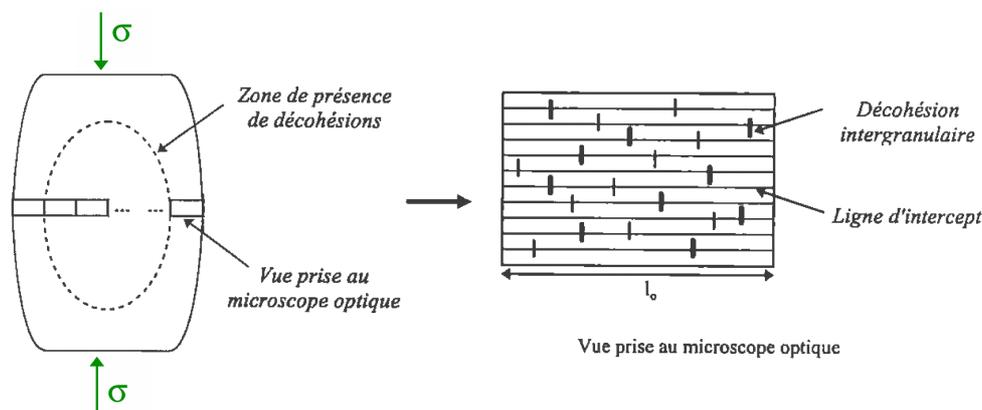


FIGURE 8.2 – Schéma de principe des mesures de décohésion [Dherbey 00]

Cette méthodologie a permis une première estimation quantitative de la contribution de la décohésion dans la déformation totale du combustible. Par la suite nous développerons une méthode de calcul de la décohésion à partir des résultats de simulation sur le VER, en travaillant par analogie avec le processus expérimental.

8.2 Simulation de l'essai

Il s'agit à présent d'étudier la réponse du VER polycristallin soumis à une sollicitation similaire à celles présentées au paragraphe précédent.

Une première simulation est réalisée à titre exploratoire en introduisant dans l'agrégat des zones cohésives infiniment rigides de la même manière qu'au paragraphe 7.2.3. L'analyse des résultats obtenus nous permet d'estimer un plage d'étude adaptée pour les paramètres de la loi de décohésion présentée au paragraphe 4.4.2.

8.2.1 Un premier calcul en l'absence de décohésion

8.2.1.1 Caractéristiques de la simulation

Ce calcul (ainsi que les suivants) a été mené sur un agrégat 3D périodique à 40 grains. Du fait de l'introduction d'éléments cohésifs à l'interface entre les grains et des limitations logicielles, nous avons fait appel à des éléments à interpolation linéaire pour le maillage du VER.

La loi ld_2 a été mise en oeuvre pour le comportement intragranulaire, tandis que les zones cohésives sont élastiques infiniment rigides dans ce premier calcul. Rappelons que nous visons principalement ici à analyser la réponse effective du polycristal et la manière dont évoluent les contraintes aux joints de grains au cours de l'essai.

Le chargement de fluage est modélisé par une montée en charge de $\Sigma_{zz} = 0$ MPa à $\Sigma_{zz} = -40$ MPa en 10s (les autres composantes de la contrainte effective sont imposées nulles) puis un maintien à contrainte constante pendant environ six heures. Conformément aux essais expérimentaux la température du VER est imposée constante à 1465 C.

8.2.1.2 Analyse des résultats

Plusieurs observations peuvent être tirées de l'analyse de la réponse de l'agrégat.

La figure 8.4, en particulier, présente la valeur $\max_{jdg} (\bar{\sigma}_n^{jdg})$ maximale de la contrainte normale moyenne par joint de grains au cours du temps. Remarquons tout d'abord que la courbe passe par un maximum puis décroît brièvement avant de se stabiliser : cette allure nous est à présent familière, et de la même manière que pour le pic de compression observé lors des simulations d'essais à Vitesse de Déformation Constante, le caractère adoucissant du matériau est associé à la multiplication des dislocations.

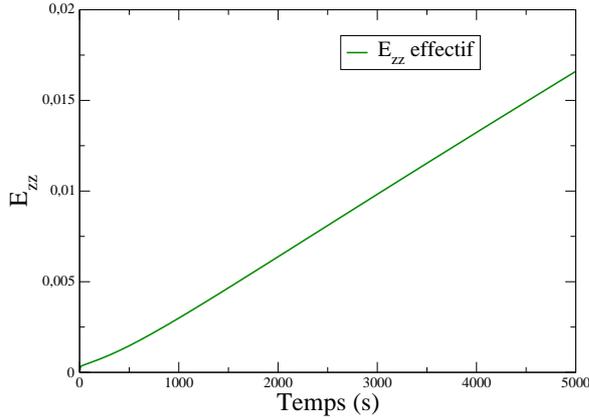


FIGURE 8.3 – Déformation axiale effective E_{zz} au cours du temps

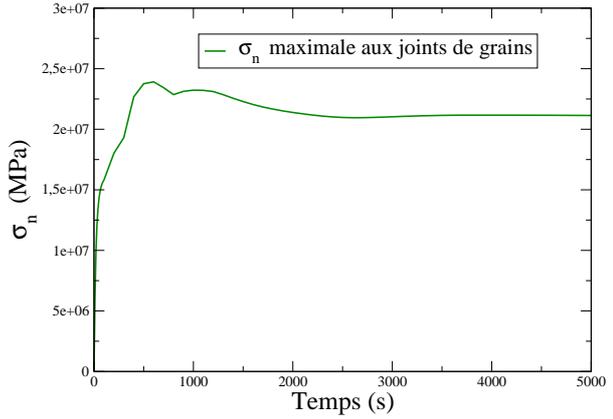


FIGURE 8.4 – Valeur maximale de la contrainte normale moyenne par joint de grain au cours du temps

Les résultats présentés aux figures 8.3 et 8.4 nous permettent de faire un certain nombre d'observations vis-à-vis de la décohésion intergranulaire.

Notons tout d'abord que le maximum de contrainte en traction est obtenu pour $t \simeq 500s$. Rappelons ici que la loi cohésive proposée au chapitre 4 modélise un mécanisme de fissuration instantané, piloté par un seuil en contrainte. Ceci signifie que la décohésion apparaîtra au plus tard pour des niveaux de déformation effective de l'ordre de 0.2% (d'après la courbe de fluage 8.3). Cette valeur est bien inférieure au 1 - 2 % observés expérimentalement.

Par ailleurs, la figure 8.3 montre que la vitesse de déformation axiale effective \dot{E}_{zz} se stabilise après quelques centaines de secondes. Les contraintes normales aux joints de grains, quant à elles, continuent d'évoluer et ne se stabilisent qu'après 2000 secondes : cette évolution de l'hétérogénéité du champ de contraintes peut s'expliquer par la cinétique des densités de dislocations, qui peut modifier localement le comportement mécanique des grains même après que le comportement effectif du VER est entré en régime stationnaire.

Quant aux valeurs de contraintes atteintes, elles nous permettent d'encadrer la valeur du paramètre σ_n^{max} du modèle de décohésion dans un intervalle judicieux.

8.2.2 Vers la prise en compte de la décohésion intergranulaire

L'étude préliminaire nous a permis d'anticiper un certain nombre de difficultés liées à la prise en compte de la décohésion intergranulaire dans le cadre de la simulation d'un essai de fluage. Il s'agit maintenant de mettre en place les éléments nécessaires à la modélisation.

8.2.2.1 Modélisation de la décohésion

La prise en compte de la décohésion et du glissement intergranulaire est réalisée en associant aux éléments cohésifs la loi de comportement présentée au paragraphe 4.4.2. Comme nous l'avons vu, celle-ci est constituée d'un régime élastique (caractérisé par la raideur K_n), suivi d'une phase d'endommagement, qui se déclenche lorsque la contrainte normale atteint une valeur seuil σ_n^{max} . Les longueurs caractéristiques δ et δ_c correspondent respectivement au début de l'endommagement de la zone cohésive et à sa ruine.

Pour toute l'étude la valeur de la raideur élastique des zones cohésives a été imposée de façon à ne pas modifier la raideur apparente du VER². En fixant des valeurs de σ_n^{max} uniformément réparties sur un intervalle [10; 30] MPa, les valeurs des paramètres δ , δ_c et de l'énergie de fissuration w^{ref} sont déterminées à partir des équations constitutives du modèle.

Notons en particulier que la valeur de w_{ref} associée à la zone cohésive³ est définie avec :

$$w_{ref} = 2 \frac{(9 - 4 \ln 4) \sigma_n^{max^2}}{K_n} \quad (8.1)$$

ce qui signifie que l'augmentation du seuil de décohésion σ_n^{max} à raideur élastique fixée provoque une augmentation de l'énergie de fissuration contenue par l'élément cohésif, comme illustré figure 8.5 : non seulement il est nécessaire d'atteindre une contrainte plus importante pour endommager la zone cohésive, mais il faut une plus grande quantité d'énergie pour entraîner sa ruine.

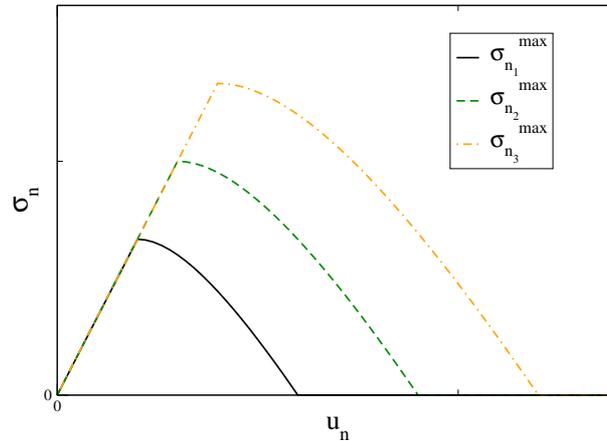


FIGURE 8.5 – Allure de la courbe de traction de l'élément cohésif pour différentes valeurs du seuil de décohésion $\sigma_{n3}^{max} \geq \sigma_{n2}^{max} \geq \sigma_{n1}^{max}$

Nous verrons par la suite la manière dont ce double effet affecte les résultats de la simulation.

8.2.2.2 Estimation de la décohésion aux joints

Il reste à proposer une estimation de la déformation intergranulaire cohérente avec les mesures expérimentales. Plutôt que d'analyser localement les phénomènes de décohésion, proposons un critère effectif similaire à celui utilisé dans [Dherbey 00] :

2. Nous vérifions la relation $K_n \geq \frac{21E}{L_{mesh}}$ de Perales et al. reliant la raideur K_n des zones cohésives, le module d'Young E du matériau et la dimension caractéristique L_{mesh} des mailles

3. Les valeurs d'énergie de fissuration utilisées dans notre étude, comprises entre 0.06 J.m^{-2} et 0.3 J.m^{-2} , sont légèrement supérieures à la valeur numérique $w_{ref} = 0.025 \text{ J.m}^{-2}$ issue de l'identification proposée par [Vincent 07]

$$\varepsilon^{inter} = \frac{1}{\tilde{N}} \sum_{i \in \tilde{N}} \frac{\Delta l^i}{l_0 - \Delta l^i} \quad (8.2)$$

où \tilde{N} , Δl^i et l_0 sont respectivement le nombre de lignes d'intercept, la somme des décohésion sur la ligne n i et la dimension de l'échantillon déformé. Selon des considérations similaires, nous pouvons définir une ouverture moyenne des joints de grains dans le VER selon une direction \mathbf{X} avec :

$$\Delta l(\mathbf{X}) = \sqrt[3]{N_g} \frac{1}{S_j} \int_{S_j} \Delta \mathbf{U} \cdot \mathbf{X} \, dS \quad (8.3)$$

avec N_g le nombre de grains dans l'agrégat, S_j la surface de l'ensemble des joints de grains et $\Delta \mathbf{U}$ le déplacement relatif entre les lèvres de la zone cohésive. Par analogie avec la procédure expérimentale $\sqrt[3]{N_g}$ représente le nombre moyen de joints de grains dans le VER selon une direction donnée et le terme intégral correspond à l'ouverture moyenne des joints dans la direction considérée. Par la suite nous nous intéresserons uniquement aux directions $(\mathbf{Ox}, \mathbf{Oy})$ orthogonales à l'axe de compression et pour lesquelles la décohésion expérimentale a été observée.

Selon le même principe nous pouvons identifier la dimension du polycristal déformé :

$$l_0(\mathbf{X}) \equiv L_{ver}(1 + E_{XX}) \quad (8.4)$$

où L_{VER} et \mathbf{E} sont respectivement la longueur initiale et la déformation effective du VER. De même, il vient :

$$l_0(\mathbf{X}) - \Delta l(\mathbf{X}) \equiv \frac{1}{L_{VER}^3} \int_{V_g} \varepsilon_{XX}^g \, dV \quad (8.5)$$

avec V_g le volume de l'ensemble des grains et ε^g la déformation intragranulaire. En réinjectant (8.3), (8.4) et (8.5) dans (8.2) nous pouvons donc définir une déformation intergranulaire moyenne sous la forme suivante :

$$\varepsilon^{gbs}(\mathbf{X}) = \frac{\sqrt[3]{N_g} \frac{1}{S_j} \int_{S_j} \Delta \mathbf{U} \cdot \mathbf{X} \, dS}{\frac{1}{L_{VER}^3} \int_{V_g} \varepsilon_{XX}^g \, dV} \quad (8.6)$$

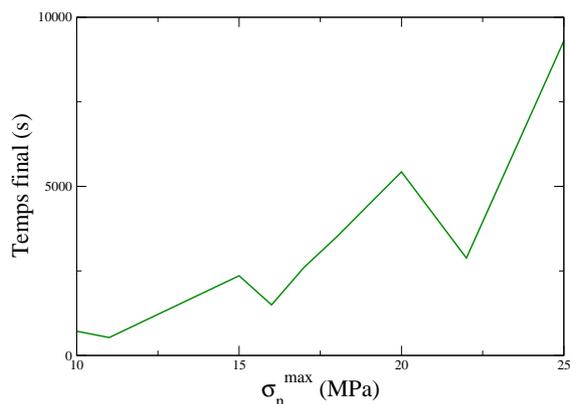
A travers l'équation (8.6) nous disposons d'un observable du rôle de la décohésion dans la déformation de l'agrégat en cohérence avec les mesures expérimentales. Tous les éléments sont réunis pour analyser les résultats des simulations.

8.2.3 Résultats de la simulation

Plusieurs simulations d'essais de fluage ont été réalisées en reprenant le chargement décrit au paragraphe 8.2.1.1 et en prenant successivement le seuil de décohésion $\sigma_n^{max} = \{10, 15, 17, 20\}$ MPa. Dans un premier temps nous nous limitons à des observations qualitatives de la déformation intergranulaire, avant d'analyser de façon plus détaillée les résultats obtenus.

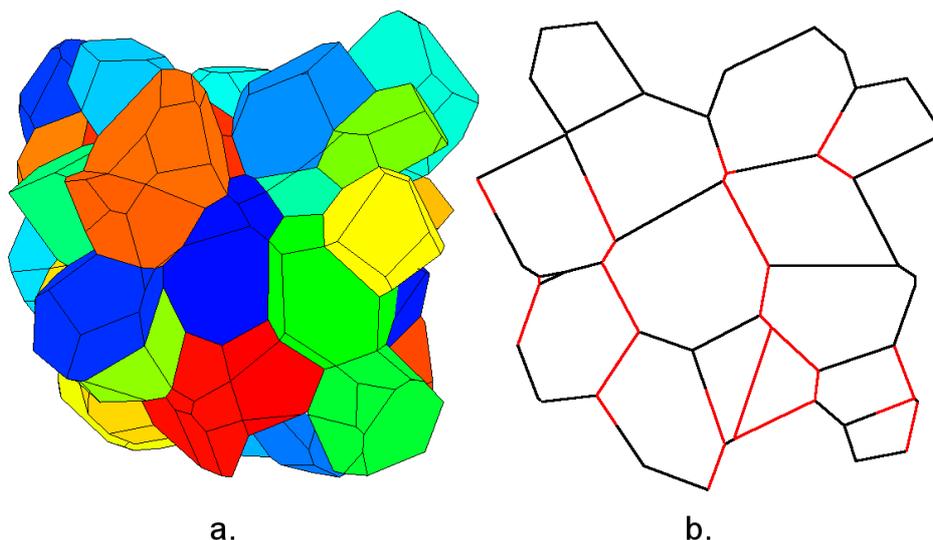
8.2.3.1 Observations qualitatives et aperçu des résultats

Il apparaît en premier lieu que du fait de problèmes de convergence numérique, aucune des simulations n'a pu être menée jusqu'à son terme. La figure 8.6 présente le temps atteint en fin de calcul pour les différentes valeurs de σ_n^{max} utilisée.

FIGURE 8.6 – Temps de fin du calcul en fonction de σ_n^{max}

L'explication la plus vraisemblable à ce stade est que le fait d'augmenter le seuil de décohésion limite l'ouverture des joints, et par conséquent les difficultés numériques. Cette intuition peut être vérifiée en s'intéressant au nombre de joints de grains complètement endommagés (ie. pour lesquels $\beta = 0$) en fin de calcul. Dans le cas du calcul pour $\sigma_n^{max} = 10MPa$ il apparaît que, sur les 301 joints de grains que compte le VER, 81 ont perdu toute rigidité. Ces joints de grains "rompus" sont représentés en rouge sur la vue en coupe de la figure 8.7.

Du fait de cette perte de rigidité il est plus que vraisemblable que des modes de corps rigides apparaissent dans le problème éléments finis et entraînent les problèmes de convergence numérique observés. Cette intuition est vérifiée par l'analyse des profils de décohésion présentés à la figure 8.8 qui mettent en évidence la fragmentation du polycristal en plusieurs parties indépendantes.

FIGURE 8.7 – Agrégat (a.) et représentation des zones cohésives entièrement endommagées en fin de simulation (en rouge) sur une vue en coupe (b.). Cas du calcul pour $\sigma_n^{max} = 10MPa$

En l'absence d'éléments de comparaison quantitatifs issus de mesures expérimentales, il est

difficile de valider les profils de décohésion issus de la simulation. Notons toutefois que, même si le nombre de joints de grains rompus peut être élevé (jusqu'à un quart de l'ensemble des joints de grains pour la simulation $\sigma_n^{max} = 10MPa$), les niveaux d'ouverture restent très faibles par rapport à ceux observés sur les micrographies expérimentales.

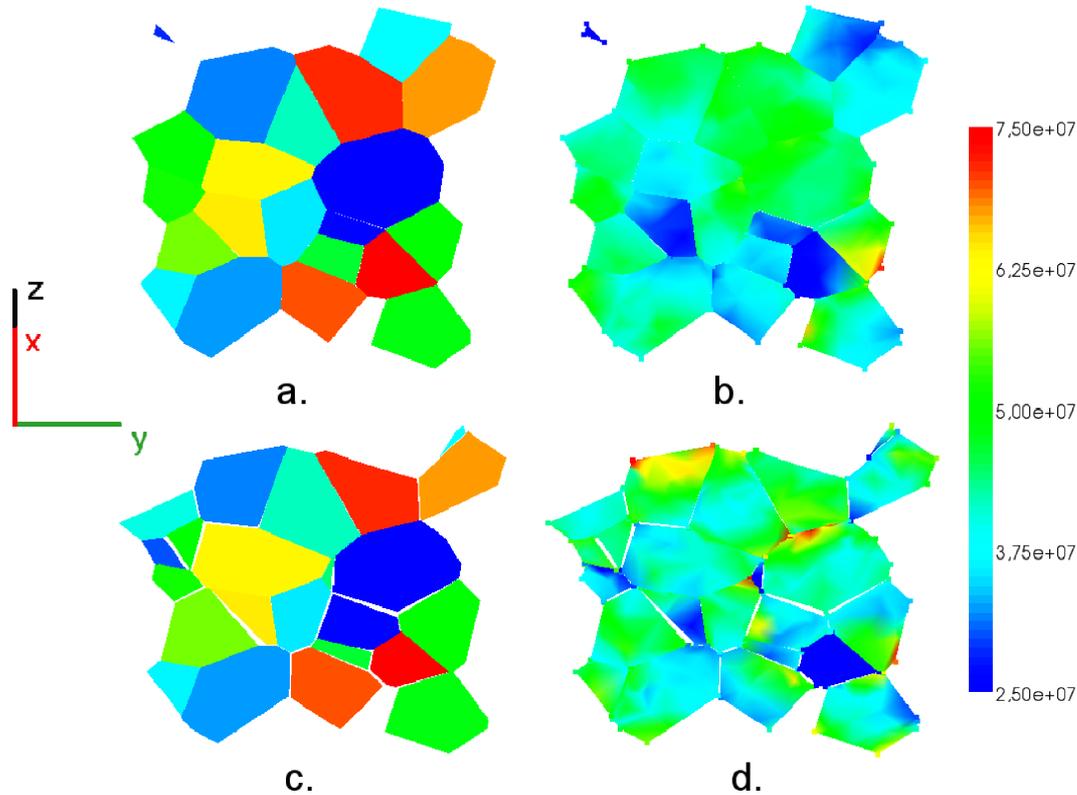


FIGURE 8.8 – Analyse des profils de décohésion et répartition de la contrainte équivalente de Von Mises sur une vue en coupe : déformée (amplification $\times 20$) et σ^{eq} à $t = 200s$ (a., b.) et à $t = 715s$ (c., d.). Cas de la simulation avec un seuil de décohésion $\sigma_n^{max} = 10 MPa$

La figure 8.8 met par ailleurs en évidence la redistribution des contraintes associée au processus de fissuration. Cette redistribution permet d'expliquer l'initiation de la décohésion aux joints triples selon un mécanisme similaire à celui proposé par [Kassner 03]. Ce type de mécanisme, illustré à la figure 8.9, a été observé expérimentalement par [Dherbey 00] dans le cas de l' UO_2 .

Nous nous sommes limités jusqu'ici à une analyse qualitative de la décohésion. Le prochain paragraphe vise à décrire les résultats de simulations de manière plus systématique.

8.2.3.2 Analyse

La déformation générée par la décohésion intergranulaire, dont nous avons donné une définition via l'équation (8.6), peut se décomposer en deux facteurs :

- d'une part, le nombre de joints de grains effectivement rompus, qui est directement fonction du seuil de décohésion ;
- d'autre part, l'ouverture des joints de grains rompus, qui dépend aussi du comportement des éléments cohésifs en endommagement.

Ce paragraphe est consacré à l'étude successive de ces deux facteurs. Nous pourrons par la suite conclure sur la déformation par décohésion aux joints de grains proprement dite.

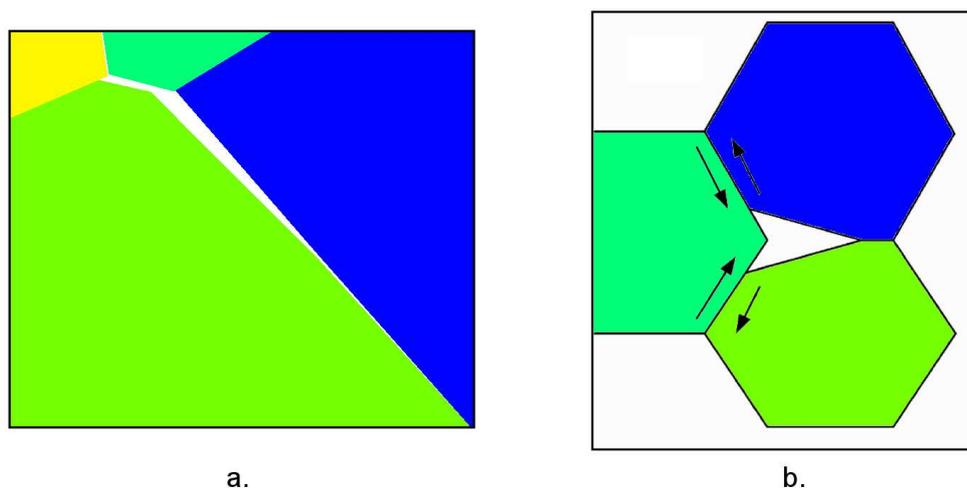


FIGURE 8.9 – Initiation de la décohésion au joint triple : détail d'un plan de coupe pour le calcul avec un seuil de décohésion $\sigma_n^{max} = 20MPa$ (a.) et représentation schématique [Kassner 03] (b.)

Afin de mieux comprendre le rôle du seuil de décohésion au cours du calcul, nous présentons à la figure 8.10 l'évolution du nombre de joints de grains ouverts (pour lesquels $u_n^* \geq \delta$ en tout point) au cours du temps. Comme nous l'avons vu au paragraphe 8.2.1.2, le maximum de contrainte en traction aux joints de grains est atteint pour $\varepsilon \in [0.05; 0.15]$ %. La décohésion, qui se produit selon un mécanisme de fissuration instantanée, est amorcée pour ces niveaux de déformation. Suite à cette première phase, la propagation des fissures intergranulaires mène à la rupture de nouveaux joints de grains.

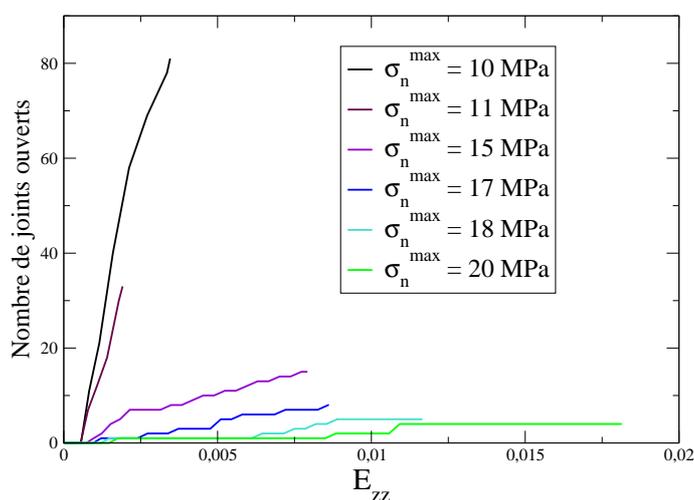


FIGURE 8.10 – Nombre de joints de grains à contrainte nulle en fonction du temps

De ce point de vue, le seuil de décohésion affecté aux éléments cohésifs pilote d'une part l'instant où débute l'ouverture des joints de grains, et d'autre part le nombre de joints de grains ouverts.

Avant d'analyser les résultats en termes de déformation par décohésion intergranulaire, nous nous intéressons maintenant à l'ouverture maximale aux joints, définie comme suit :

$$u_n^{max}(t) = \max_{jdg} \left(\int_{S_{jdg}} \Delta u_n dS \right) \quad (8.7)$$

La figure 8.11 présente l'évolution temporelle de $u_n^{max}(t)$ pour les différentes simulations. Il apparaît immédiatement que la valeur du seuil de décohésion retenue continue d'affecter le comportement du joint de grain même après le début de l'ouverture, c'est-à-dire pour $u_n^\mu \geq \delta_c$.

En réalité ce résultat n'est pas surprenant si nous revenons à la définition de l'énergie de fissuration w_{ref} donnée à l'équation (8.1) : en augmentant la valeur du seuil de décohésion, et compte tenu de la forme de la loi de comportement des éléments cohésifs, nous augmentons l'énergie à apporter à l'élément pour entraîner sa ruine. C'est pour cette raison que l'ouverture maximale des joints de grains $u_n^{max}(t)$ se trouve elle aussi être dépendante du paramètre σ_n^{max}

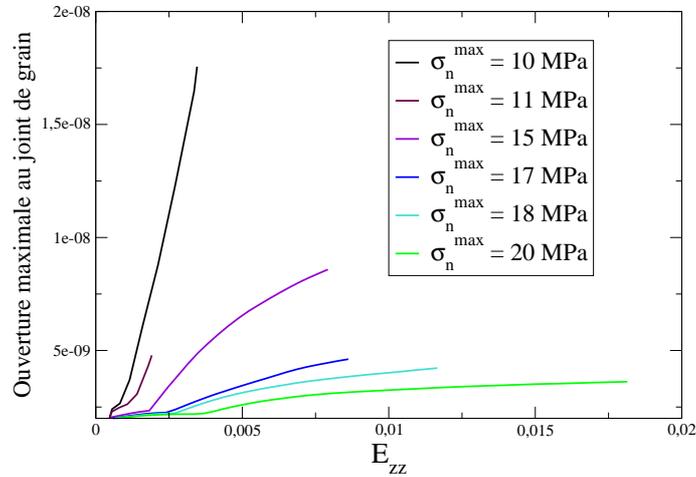


FIGURE 8.11 – Ouverture maximale atteinte en fonction du temps

Nous avons déjà abordé la notion de double conséquence associée à l'augmentation du seuil de décohésion au paragraphe . Les résultats de simulations mettent en évidence les conséquences de cet effet qui complique sensible l'identification des paramètres du modèle.

La comparaison avec les mesures expérimentales met en évidence les limites de l'approche proposée, comme illustré à la figure 8.12. Seule l'utilisation d'un seuil de décohésion très faible permet de retrouver une contribution du glissement à la déformation totale du polycristal réaliste ($\frac{\varepsilon^{gbs}}{\varepsilon^{tot}} (\sigma_n^{max} = 10 MPa) = 22.5\%$ contre 25% expérimentalement), mais le niveau maximum de déformation atteint avant rupture de l'agrégat est très faible (environ 0.3%) en comparaison des essais expérimentaux, pour lesquels la déformation axiale totale atteignait 5.9 %.

L'écart entre les données expérimentales et les résultats de simulation s'explique principalement par le choix de modéliser un mécanisme de fissuration instantané, piloté par un seuil en contrainte. L'une des faiblesses de ce type de modèle, déjà mentionnée par [Diard 01] pour l'étude des mécanismes de rupture de la gaine du crayon combustible, est son incapacité à prendre en compte les phénomènes d'endommagement progressif ou d'historique de chargement, étudiés notamment par [Gaffard 05]. La prise en compte de l'endommagement différé des joints de grains par cavitation de cavités, faisant diminuer progressivement le seuil de décohésion σ_n^{max} , pourrait permettre de mieux rendre compte des essais expérimentaux en retardant la rupture intergranulaire. [Michel 04], notamment, a proposé un modèle d'endommagement volumique par fluage associé à ce type de mécanisme. D'autres travaux (voir notamment [Espinosa 00])

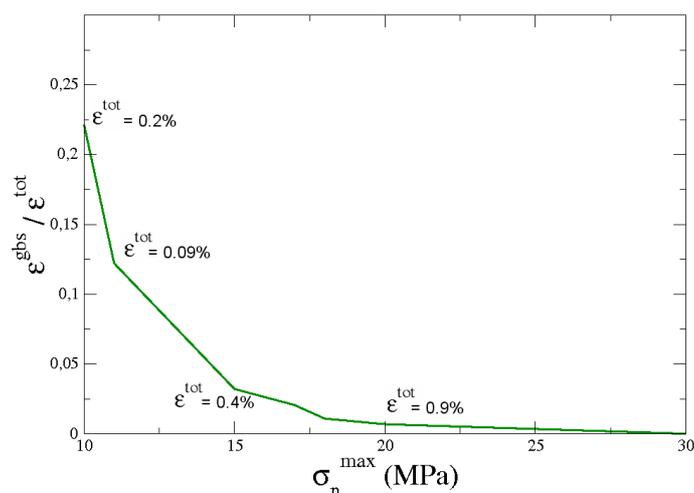


FIGURE 8.12 – Proportion de la déformation due à la décohesion dans la déformation totale de l'agrégat en fonction de la valeur du seuil de décohesion.

proposent d'introduire une dépendance de la courbe de traction de la zone cohésive (présentée à la figure 4.27) à un paramètre de chargement $\dot{\lambda}$ caractérisant la vitesse de sollicitation. Ce type de formulation pourrait permettre de nous rapprocher des niveaux de déformations totales pour lesquels le début de la décohesion est observé expérimentalement.

L'analyse de ces premiers calculs de décohesion a permis de mettre en avant les possibilités offertes par l'utilisation de zones cohésives pour la modélisation du comportement intergranulaire tout en soulevant les difficultés, principalement numériques, liées à l'utilisation de ces modèles. Nous allons maintenant revenir sur les conclusions à tirer de cette étude, ainsi que sur les perspectives qu'elle offre.

8.3 Conclusions

8.3.1 Bilan des simulations de décohesion

La modélisation du comportement mécanique des joints de grains dans le polycristal d' UO_2 a été abordée au cours de ce chapitre. Notre objet ici est avant tout de démontrer l'intérêt et la faisabilité d'une telle modélisation, pour laquelle les zones cohésives s'avèrent remarquablement adaptées du fait de la connaissance a priori du trajet de la fissuration intergranulaire.

Les premiers résultats de simulation prouvent la capacité du modèle à représenter fidèlement des phénomènes complexes d'interaction entre glissement et décohesion, notamment au niveau des joints triples. Des difficultés numériques ont jusqu'ici limité notre analyse des simulations. Nous avons associé ces difficultés à la perte de rigidité du VER, mais d'autres pistes pourront être investiguées à l'avenir⁴

Des indicateurs ont été mis en place pour comparer la réponse de notre modèle de décohesion aux mesures expérimentales, notamment dans le but de quantifier la contribution de la décohesion intergranulaire à la déformation totale du combustible. Le fait de se limiter à la modélisation d'un

4. En particulier, des instabilités numériques peuvent apparaître dans certaines situations où l'énergie de fissuration dissipée par la zone cohésive est inférieure à l'énergie élastique emmagasinée par la structure. Les sauts de solutions qui résultent de ces instabilités peuvent être traités par une approche dynamique du problème.

mécanisme de fissuration instantané ne permet pas de reproduire les résultats d'essais réalisés sur l' UO_2 de façon satisfaisante, et, pour cette raison, la mise en oeuvre de ce modèle de décohésion ne sera pas étendue à l'étude de la réponse du polycristal d' UO_2 soumis à une sollicitation de type irradiation en rampe de puissance, telle que nous la proposerons au chapitre suivant. Néanmoins, quelques perspectives pour améliorer ce modèle ont déjà été évoquées au cours de l'étude, et vont être reprises au paragraphe suivant.

8.3.2 Perspectives pour la modélisation du comportement intergranulaire

Comme nous l'avons déjà évoqué au paragraphe , la formulation de notre modèle ne nous permet pas de paramétrer indépendamment le seuil de décohésion et l'énergie de fissuration. Il serait intéressant de réécrire le modèle de décohésion de façon à disposer de trois paramètres indépendants :

- la raideur élastique K_n , dont la valeur est fonction du raffinement du maillage et des propriétés élastiques intragranulaires ;
- le seuil de décohésion, qui peut être estimé à partir d'une simulation sans décohésion telle que celle présentée dans ce chapitre ;
- l'énergie de fissuration, pour laquelle nous disposons d'une première estimation [Vincent 07].

Comme nous l'avons déjà évoqué au paragraphe 8.2.3, la modélisation des phénomènes de décohésion intergranulaire observés expérimentales nécessite de tenir compte des phénomènes d'endommagement différé des joints de grains par des mécanismes de cavitation dans la formulation du modèle de zones cohésives.

A plus long terme, la prise en compte des effets de l'irradiation sur le comportement des joints de grains est une étape indispensable pour la modélisation du polycristal d' UO_2 . La présence de produits de fission gazeux dans les cavités intergranulaires peut en particulier accélérer les mécanismes d'endommagement décrits précédemment en mettant les joints de grains en traction. Ce travail de modélisation doit être accompagné par une caractérisation plus complète des effets de l'irradiation sur le comportement mécanique des joints de grains. A ce titre, une première étude expérimentale effectuée par [Balland 07] met en évidence l'influence des produits de fission sur les mécanismes de rupture du combustible.

Chapitre 9

Modélisation d'une rampe de puissance

Ce chapitre vise à proposer des éléments de discussions concernant l'apport d'une approche micromécanique pour la modélisation du comportement de l' UO_2 au cours d'une irradiation en rampe de puissance. Il s'agit à la fois de vérifier le modèle d'agrégat développé dans ce mémoire et d'illustrer son apport dans un cas industriel.

La méthode retenue consiste à générer un historique de sollicitations thermo-mécanique à partir du résultat d'un calcul macroscopique réalisé avec l'application *ALCYONE*, et à appliquer cet historique comme chargement pour le VER polycristallin. Le comportement effectif de ce dernier est comparé aux résultats d'*ALCYONE* à titre de vérification. Les distributions de contraintes locales, analysées dans le même esprit que l'étude présentée au chapitre 5, permettent de débattre des conséquences de la prise en compte de la microstructure du combustible du point de vue mécanique sur le comportement des produits de fission.

Sommaire

9.1	Positionnement du problème	180
9.1.1	Définition d'un chargement à partir des résultats d' <i>ALCYONE</i>	180
9.1.2	Cas du comportement élastique monocristallin	183
9.2	Comportement effectif du polycristal	184
9.3	Analyse des contraintes locales	186
9.3.1	Pression hydrostatique intragranulaire	187
9.3.2	Comportement intergranulaire	189
9.3.3	Approche micromécanique et couplage multi-physique : bilan	191

9.1 Positionnement du problème

L'objectif de cette étude est de comparer la réponse de notre modèle polycristallin avec le modèle de comportement thermo-mécanique macroscopique utilisé dans ALCYONE. Avant d'aborder les résultats de simulation sur le VER, il convient de préciser certains aspects du calcul, en particulier en ce qui concerne l'extraction d'un chargement à partir des résultats du calcul ALCYONE.

9.1.1 Définition d'un chargement à partir des résultats d'ALCYONE

Nous nous intéressons à l'irradiation en rampe d'un crayon pour laquelle le profil de puissance linéique au cours du temps est présenté à la figure 9.1. Plus précisément, nous cherchons à analyser le comportement de l'agrégat pendant la montée et le plateau de rampe (en orange sur la courbe).

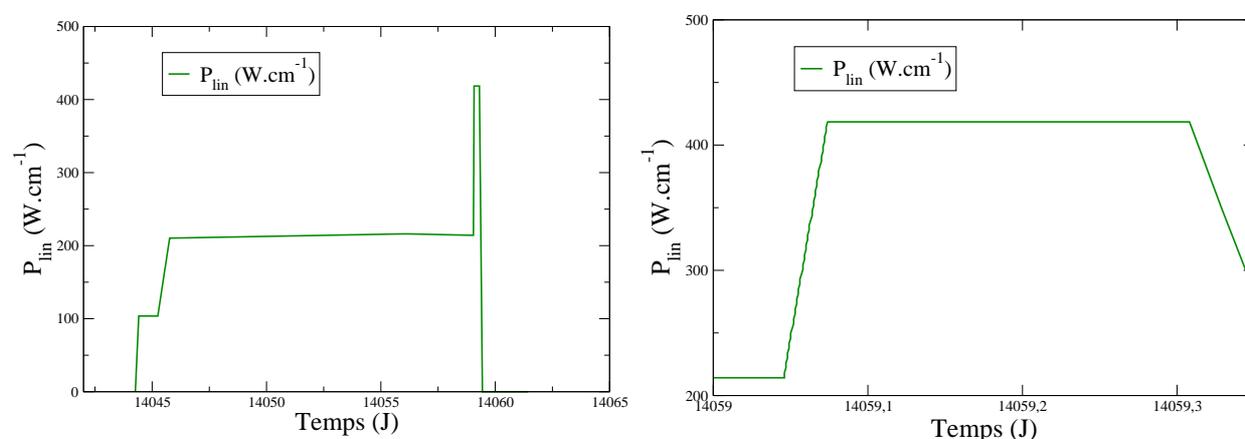


FIGURE 9.1 – Evolution de la puissance linéique du crayon au cours du temps : chargement complet (à gauche), montée et plateau de rampe (à droite)

La simulation du comportement de la pastille et de la gaine sous irradiation (historique de puissance à la figure 9.1) est réalisée à partir de la modélisation 2D multi-tranches d'ALCYONE présentée au paragraphe 2.4. La suite de cette section présente la méthodologie retenue pour extraire du calcul ALCYONE un historique en contraintes, déformations et températures qui sera réinjecté dans notre modèle d'agrégat.

9.1.1.1 De la pastille à l'agrégat polycristallin

Afin de disposer d'un aperçu de la réponse du polycristal pour les différentes conditions de sollicitation associées aux différentes zones de la pastille, nous limitons l'étude à 4 points n_i repérés par leur côte radiale r et régulièrement répartis dans la tranche axiale de combustible, comme illustré à la figure 9.2 : le point central ($n_1, r = 0$), le bord extérieur ($n_4, r = R$), ainsi que deux points de rayons intermédiaires (respectivement ($n_2, \frac{r}{R} = 0.25$) et ($n_3, \frac{r}{R} = 0.5$)).

Cette première étape réalisée, il reste encore à reconstruire un chargement thermo-mécanique pour l'agrégat à partir des résultats du calcul ALCYONE.

9.1.1.2 Construction d'un chargement thermo-mécanique

Le calcul macroscopique sur la pastille permet d'extraire un historique $[\sigma, \varepsilon, T](n_i, t)$ en contraintes, déformations et températures au cours du temps t pour chacun des noeuds n_i retenus. La température, appliquée de façon homogène à l'agrégat, permet de fixer les valeurs des termes

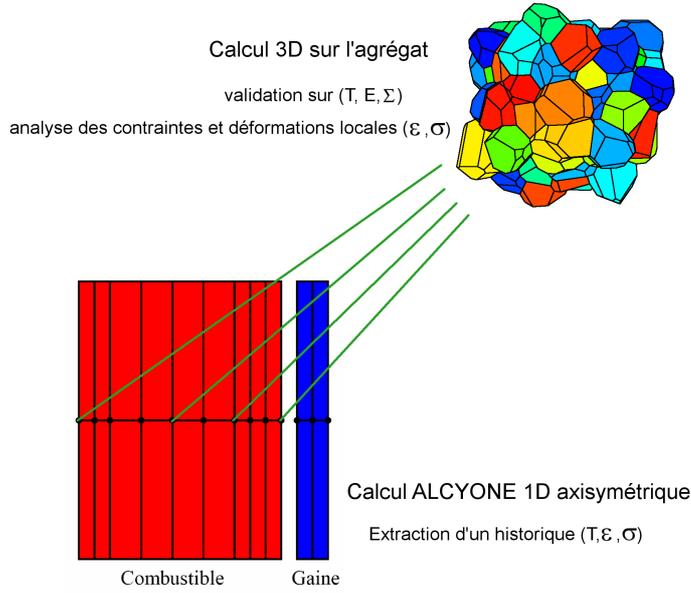


FIGURE 9.2 – Principe de l'étude : association entre un noeud du maillage macroscopique 1D issu d'ALCYONE et le VER polycristallin

d'activations associés aux différents mécanismes de fluage modélisés par la loi ld_2 présentée au paragraphe 4.3.

Du point de vue mécanique, le choix est fait de travailler à déformation imposée et de comparer les contraintes effectives obtenues sur le VER aux résultats d'ALCYONE à titre de vérification du modèle. Toutefois, la reconstruction d'un chargement thermo-mécanique à partir de l'historique de déformation issu du calcul ALCYONE ne peut pas se faire de façon immédiate. En effet, la loi de comportement $\tilde{\sigma} = f(\tilde{\epsilon})$ vérifiée en tout point de la pastille se met sous la forme :

$$\tilde{\sigma} = \tilde{C} : \left(\tilde{\epsilon}^{tot} - \tilde{\epsilon}^{fl} - \tilde{\epsilon}^{fis} - \sum_{i \in N} \tilde{\epsilon}^{gi} \right) \quad (9.1)$$

avec :

- ▷ \tilde{C} le tenseur d'élasticité du combustible ;
- ▷ $\tilde{\epsilon}^{fl}$ la déformation viscoplastique au point considéré ;
- ▷ $\tilde{\epsilon}^{fis}$ la déformation de fissuration au point considéré ;
- ▷ $\tilde{\epsilon}^{gi}$ la déformation associée au i^{eme} mécanisme de gonflement, généré par les produits de fissions dans le combustible, au point considéré.

Dans le cadre de cette étude, le modèle de décohesion intergranulaire présenté au chapitre précédent n'est pas mis en oeuvre, principalement dans une optique de limitation des temps de calcul. Ni la fissuration, ni les phénomènes de gonflement ne sont donc pris en compte dans le VER, dont la loi de comportement effective $\Sigma = g(\mathbf{E})$ s'écrit :

$$\Sigma = C_{ag} : \left(\mathbf{E}^{tot} - \mathbf{E}^{fl} \right) \quad (9.2)$$

où \mathbf{E}^{fl} et C_{ag} sont respectivement la déformation de fluage effective sur l'agrégat et le tenseur de raideur effectif du VER. Pour prendre en compte l'effet de la fissuration et des déformations de gonflement dans le calcul sur le VER, nous posons :

$$\mathbf{E}^{tot} \equiv \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{tot} - \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{fis} - \sum_{i \in N} \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{g_i} \quad (9.3)$$

La déformation effective totale imposée au VER correspond donc à la déformation totale calculée en un point de la pastille à laquelle sont retranchées les contributions associées à la fissuration et au gonflement dû aux produits de fission. Dans ce cas nous retrouvons bien :

$$\tilde{\boldsymbol{\sigma}} = \tilde{\mathbf{C}} : \left(\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{tot} - \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{fl} - \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{fis} - \sum_{i \in N} \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{g_i} \right) = \mathbf{C}_{ag} : \left(\mathbf{E}^{tot} - \mathbf{E}^{fl} \right) \quad (9.4)$$

à condition que le comportement élasto-viscoplastique effectif de l'agrégat soit proche de celui utilisé dans ALCYONE.

9.1.1.3 Etat initial en montée de rampe

Comme nous l'avons mentionné au début de ce paragraphe, la simulation du comportement du polycristal porte uniquement sur la montée en rampe et le plateau de maintien au niveau de puissance linéique maximale.

L'analyse en post-traitement du calcul ALCYONE montre que les contraintes et déformations sont non nulles en début de montée. Nous négligeons cet état initial dans un premier temps, ce qui nous permet d'écrire la déformation totale imposée au VER sous la forme incrémentale suivante :

$$\begin{cases} \mathbf{E}^{tot}(t_0) &= \mathbf{0} \\ \mathbf{E}^{tot}(t_i) &= \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{tot}(t_i) - \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{tot}(t_0) \quad \forall t_i > t_0 \end{cases} \quad (9.5)$$

où t_0 est l'instant initial de la simulation. La formulation (9.5) mène à une mauvaise estimation de la pression hydrostatique P_{hyd} dans l'agrégat. En effet, en posant $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_0 = \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{tot}(t_0)$, nous pouvons écrire :

$$P_{hyd} = \frac{\mu}{3} tr(\mathbf{E}^{tot}) = \frac{\mu}{3} tr(\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{tot}) - \frac{\mu}{3} tr(\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_0) \quad (9.6)$$

La composante hydrostatique de la déformation initiale $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_0$ génère un décalage entre les valeurs de pression hydrostatique calculées pour le VER et celles issues d'ALCYONE. Nous modifions donc l'équation (9.5) de façon à prendre en compte la totalité de la déformation macroscopique :

$$\begin{cases} \mathbf{E}^{tot}(t_0) &= \mathbf{0} \\ \mathbf{E}^{tot}(t_i) &= \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{tot}(t_i) \quad \forall t_i > t_0 \end{cases} \quad (9.7)$$

Cette nouvelle définition nous assure l'égalité entre la pression hydrostatique effective dans le VER et celle calculée au point considéré de la pastille. Concernant le déviateur des contraintes, il nous reste une difficulté à lever associée aux premiers pas de temps de la montée en rampe.

En effet, les résultats montrent qu'il existe pour le calcul ALCYONE une déformation viscoplastique non nulle en début de montée, qui permet de relaxer l'essentiel des contraintes déviatoriques dues à l'historique en base suivi du palier de conditionnement précédant le transitoire de puissance. Or, la visco-plasticité étant par nature un phénomène différé dans le temps, toute la déformation imposée à l'agrégat à l'instant initial se met sous forme élastique instantanée. Soit $t_1 = t_0 + \Delta t$ le premier pas de temps de la simulation, il vient :

$$\mathbf{E}^{tot}(t_1) = \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{tot}(t_1) \quad \text{et} \quad \begin{cases} \mathbf{E}^{tot}(t_1) &= \mathbf{E}^{el}(t_1) \\ \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{tot}(t_1) &= \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{el}(t_1) + \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{fl}(t_1) \end{cases} \quad (9.8)$$

Le comportement en fluage du combustible étant incompressible, cette surévaluation de la déformation élastique initiale porte seulement sur la composante déviatorique. Pour solutionner ce problème, nous choisissons d'annuler la déformation viscoplastique initiale dans l'agrégat. Soit $\mathbf{E}_0 = \tilde{\varepsilon}^{fl}(t_0)$ la déformation viscoplastique calculée par ALCYONE à l'instant initial, la déformation totale imposée au VER se met finalement sous la forme :

$$\begin{cases} \mathbf{E}^{tot}(t_0) &= \tilde{\varepsilon}^{el}(t_0) \\ \mathbf{E}^{tot}(t_i) &= \tilde{\varepsilon}^{tot}(t_i) - \mathbf{E}_0 \quad \forall t_i > t_0 \end{cases} \quad (9.9)$$

Cette dernière définition permet d'imposer au VER un état de sollicitation "proche" de celui du point de la pastille considéré.

Bien entendu, le chargement défini par l'équation (9.9) reste une approximation de la déformation réelle calculée par ALCYONE : il faudrait dans l'idéal simuler le comportement de l'agrégat sur l'ensemble de la base et de la rampe (palier de conditionnement initial compris) pour s'affranchir de cette approximation. Cette approximation et ses conséquences sur la validation du modèle polycristallin seront débattues au paragraphe 9.2.

9.1.2 Cas du comportement élastique monocristallin

Il reste encore à préciser une hypothèse concernant le comportement élastique du monocristal d'UO₂. En effet, les valeurs numériques des coefficients d'élasticité C_{11} , C_{12} et C_{44} utilisées dans les chapitres précédents correspondent à des mesures expérimentales réalisées à température ambiante.

Dans les gammes de température rencontrées lors d'une irradiation en rampe de puissance (typiquement, $T \in [400, 1700]C$), ces valeurs ne sont plus valables. En particulier, le module d'Young effectif E obtenu par homogénéisation périodique sur le VER selon la procédure décrite au paragraphe 4.1 est 50% supérieur à la valeur \tilde{E} utilisée dans ALCYONE, cette dernière diminuant faiblement avec la température.

Par hypothèse, nous fixons les valeurs des paramètres élastiques du monocristal avec les conventions suivantes :

$$E = \frac{C_{11}(C_{11} + C_{12}) - 2C_{12}^2}{C_{11} + C_{12}} = \tilde{E} \quad (9.10)$$

$$\nu = \frac{C_{12}}{C_{11} + C_{12}} = \tilde{\nu} \quad (9.11)$$

$$G = C_{44} = A \tilde{G} \quad (9.12)$$

avec :

- ▷ ν , $\tilde{\nu}$ les coefficients de Poisson respectifs du monocristal et de l'UO₂ macroscopique ;
- ▷ G , \tilde{G} les modules de cisaillement respectifs du monocristal et de l'UO₂ macroscopique ;
- ▷ $A = \frac{2C_{44}}{C_{11} - C_{12}}$ facteur d'anisotropie du grain.

La valeur numérique de A , mesurée expérimentalement à 25°C, est considérée indépendante de la température. Le jeu de paramètres retenus permet de retrouver le comportement élastique sphérique de la pastille, tout en conservant le degré d'anisotropie du monocristal à 20°C. La faiblesse de cette approximation concerne le module de cisaillement monocristallin, qui est sous-estimé par rapport au matériau réel¹.

1. L'erreur commise provient en réalité du choix d'imposer la valeur du coefficient ν du monocristal égal à celui utilisé pour le calcul ALCYONE. Une autre solution consisterait à modifier les paramètres d'élasticité du monocristal $C_{ij} \rightarrow C_{ij} \frac{\tilde{E}}{E}$ de façon à tenir compte de l'écart entre \tilde{E} , le module d'Young effectif du VER à 25°C, et celui de la

Nous avons présenté au cours de cette première section l'ensemble des éléments nécessaires à la mise en oeuvre de la simulation. Les paragraphes 9.2 et 9.3 vont nous permettre d'analyser successivement le comportement effectif puis local de l'agrégat soumis à une rampe de puissance.

9.2 Comportement effectif du polycristal

De la même manière qu'au chapitre 5, l'analyse en post-traitement des résultats se décompose en deux étapes : nous nous limitons dans un premier temps à l'analyse du comportement effectif du VER, pour lequel la comparaison avec les résultats issus d'ALCYONE sont pris comme valeurs de référence.

La figure 9.3 présente l'évolution de la pression hydrostatique effective dans l'agrégat pour les différentes simulations correspondant aux points n_i de la pastille considérés.

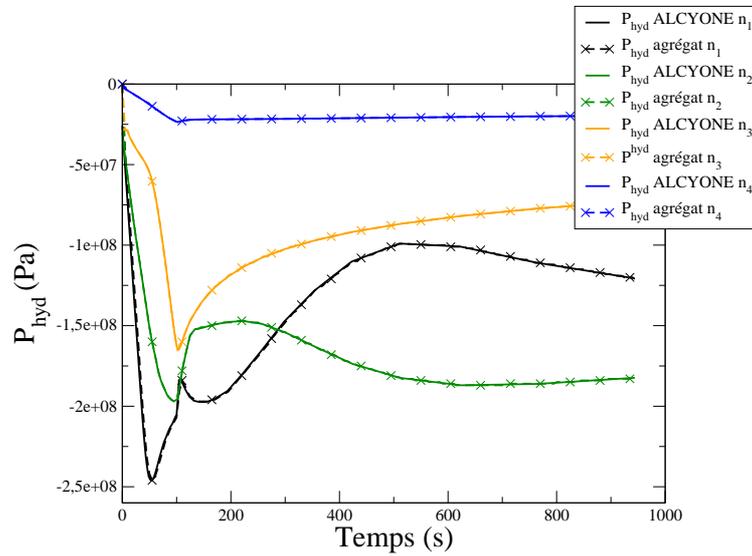


FIGURE 9.3 – Evolution de la pression hydrostatique effective : point central pastille n_1 (noir), points intermédiaires n_2 (vert) et n_3 (orange), et point extérieur pastille n_4 (bleu)

L'allure générale des courbes obtenues présente une montée en compression correspondant à la montée en température de la pastille, suivie d'une phase adoucissante pilotée par la relaxation des contraintes déviatoriques par fluage. Les valeurs obtenues par la simulation sur le VER sont identiques à celles issues d'ALCYONE. Ce résultat était attendu, dans la mesure où le comportement sphérique (purement élastique) du monocristal a été directement tiré des propriétés élastiques de la pastille.

Les distributions de contraintes effectives Σ_{rr} , $\Sigma_{\theta\theta}$ et Σ_{zz} , présentées à la figure 9.4, donnent un aperçu plus complet du comportement du polycristal.

Bien que nous puissions observer un accord qualitatif satisfaisant entre les contraintes calculées pour l'agrégat et celles obtenues à l'échelle macroscopique, des écarts significatifs (jusqu'à 50 MPa)

pastille combustible à haute température.

Cette définition revient à imposer $E = \tilde{E}$ comme précédemment, mais la valeur du coefficient de Poisson est cette fois-ci égale à $\frac{C_{12}}{(C_{11}+C_{12})}$. Bien qu'elle offre un compromis intéressant en termes de représentativité du comportement élastique sphérique et déviatorique, nous n'avons pas fait appel à cette méthode, qui nécessite de recalculer le rapport entre les modules d'Young $\frac{\tilde{E}}{E}$ pour chaque VER.

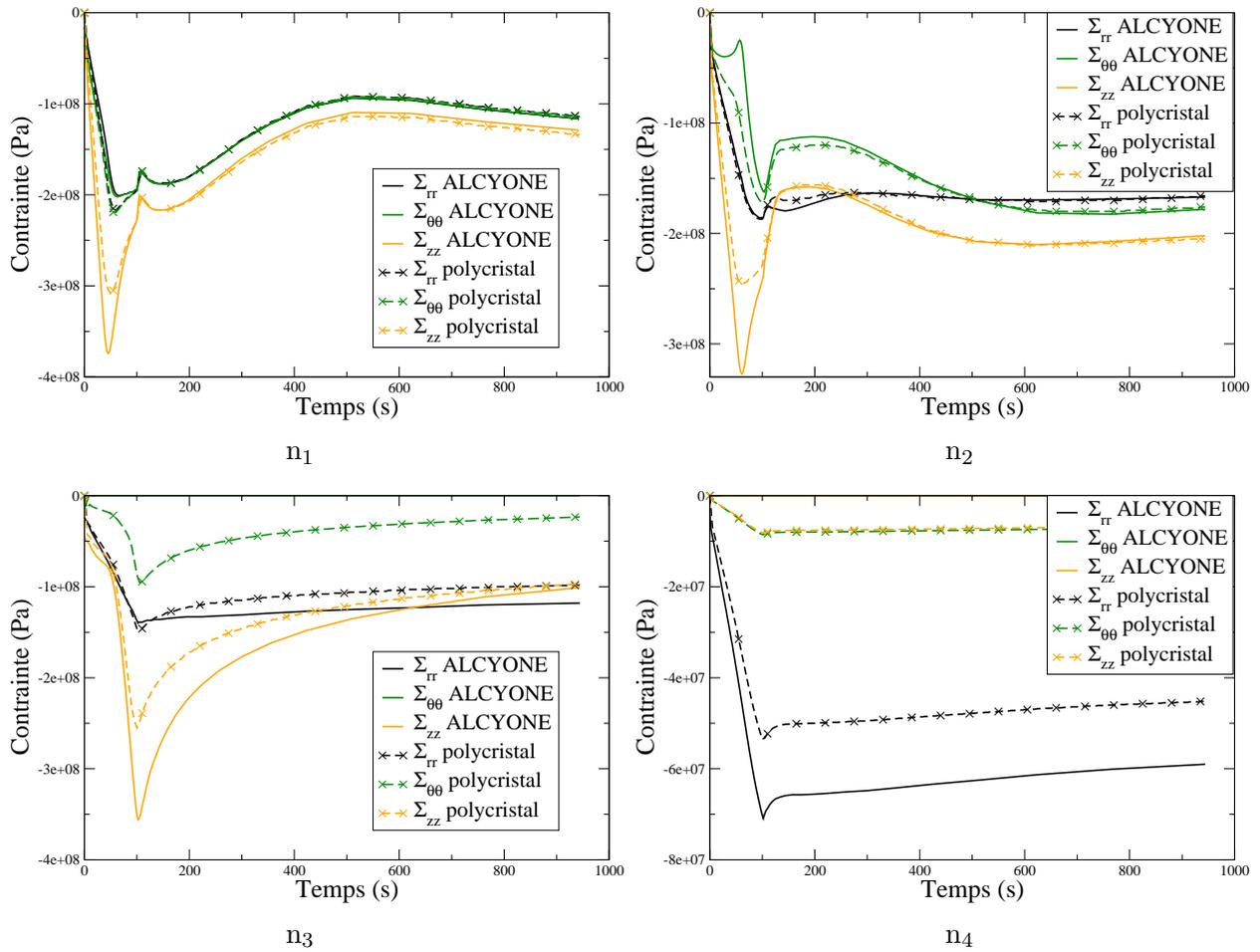


FIGURE 9.4 – Evolution de la contrainte effective au cours du temps

peuvent apparaître. De nombreux facteurs peuvent expliquer les différences observées :

- le schéma 1D d'ALCYONE n'utilise pas la loi Gatt-Monerie qui a servi comme base pour la validation de notre modèle de fluage monocristallin. C'est en effet la loi LPCC, décrite au paragraphe 2.4, qui est mise en oeuvre dans ce cas.
- les résultats de l'identification numérique des paramètres de la loi ld_2 (présentés au paragraphe 4.3) montrent que l'accord entre le comportement effectif de l'agrégat en fluage et les modèles macroscopiques de référence est moins bon dans le domaine des hautes températures ($T \geq 1500^\circ C$) rencontrées au centre de la pastille au cours de la rampe d'irradiation. Ceci peut expliquer les écarts observés pour les calculs n_1 et n_2 en particulier.
- enfin, l'hypothèse retenue concernant les propriétés élastiques du monocristal à haute température reste largement questionnable pour les composantes déviatoriques de la contrainte.

Ce dernier point est particulièrement sensible pour le point extérieur pastille, pour lequel la déformation visco-plastique est pratiquement négligeable. La figure 9.5 présente l'évolution de cette contrainte équivalente de Von Mises au cours du temps. La comparaison entre les résultats issus d'ALCYONE et ceux obtenus par simulation sur l'agrégat révèle que l'écart observé correspond à la différence de pente initiale lors de la montée en température, laquelle dépend directement des propriétés élastiques du matériau.

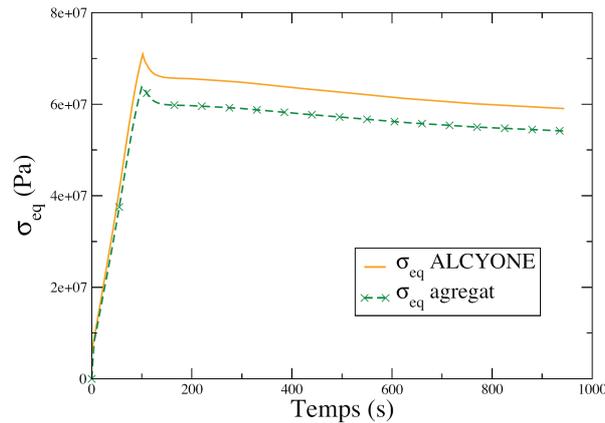


FIGURE 9.5 – Evolution de la contrainte équivalente de Von Mises en fonction du temps au point externe pastille n_4 : comparaison entre le calcul ALCYONE et la simulation sur l'agrégat

De façon générale, les résultats obtenus montrent que dans les cas où le fluage est prépondérant (dans la zone centrale de la pastille, soient les calculs n_1 et n_2 principalement) les contraintes sont correctement calculées sur le plateau de maintien et l'erreur commise se limite au régime transitoire en montée de rampe.

Dans la partie externe de la pastille, l'activation du fluage reste limitée et le combustible se déforme principalement par fissuration. Cette déformation est prise en compte à travers l'équation (9.3) et, en l'absence de fluage, le comportement du VER reste quasi-exclusivement élastique. Si l'estimation du comportement sphérique du combustible reste correcte, la définition des propriétés élastiques du monocristal retenue au paragraphe 9.1.2 génère de façon prévisible une différence significative entre le comportement déviatorique de l'agrégat et celui de la pastille dans ALCYONE.

Cette première analyse des résultats obtenus, limitée au comportement effectif du VER, a pour objectif principal de valider la réponse de notre modèle polycristallin. Il nous reste maintenant à décrire les distributions de contraintes locales obtenues et leur possibles conséquences sur la diffusion des produits de fission gazeux.

9.3 Analyse des contraintes locales

De façon analogue au travail présenté au chapitre 5, nous étudions au cours de ce paragraphe le comportement local de l'agrégat à travers la caractérisation de distributions de contraintes inter- et intragranulaires.

Les résultats présentés au paragraphe précédent ont montré que dans la partie externe de la pastille (simulations n_3 et n_4), le comportement effectif du VER est différent de la réponse ALCYONE. Par ailleurs, les hypothèses relatives à la modélisation 1D d'ALCYONE² ne nous permettent pas d'analyser les contraintes dans les zones fissurées du combustible. Pour ces raisons, nous nous limiterons à l'étude des calculs n_1 et n_2 , qui correspondent aux points les plus proches du centre de la pastille.

2. Nous reviendrons sur ce point précis au paragraphe 9.3.3

9.3.1 Pression hydrostatique intragranulaire

Nous nous intéressons ici aux distributions de pression hydrostatique intragranulaire $\overline{P_{hyd}}^g$. Celle-ci, rappelons-le, affecte directement l'état de contrainte des cavités intragranulaires et donc leur évolution sous irradiation.

9.3.1.1 Pression hydrostatique moyenne par grain

Dans un premier temps, l'analyse des résultats se limite aux valeurs de pression hydrostatique moyennes par grain. La partie centrale de la pastille étant principalement en situation de compression hydrostatique, la pression hydrostatique intragranulaire reste remarquablement uniforme d'un grain à l'autre. La figure 9.6 présente l'évolution de l'écart-type sur la distribution de pressions hydrostatiques moyennes au cours du temps pour les deux calculs n_1 et n_2 .

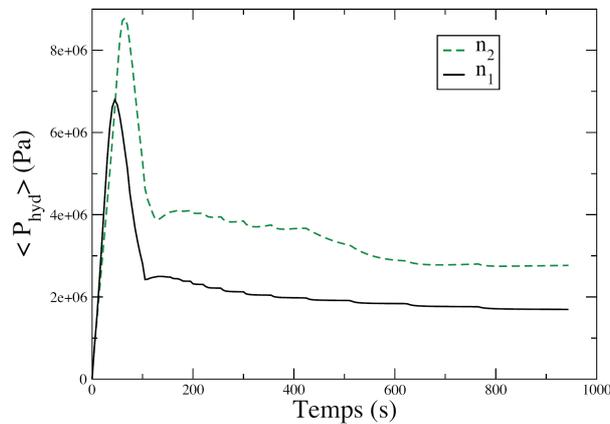


FIGURE 9.6 – Evolution l'écart-type sur la distribution de pressions hydrostatiques intragranulaires moyennes $\overline{P_{hyd}}^g$ au cours du temps. Cas des simulations n_1 (courbe noire) et n_2 (courbe verte)

Dans les deux cas, les fluctuations observées ne dépassent pas quelques % de la valeur effective sur le polycristal. L'évolution temporelle se caractérise par trois phases successives :

- une augmentation de l'écart-type dans la première partie de la montée en rampe, au cours de laquelle le comportement des grains est élastique ;
- une rapide décroissance, qui correspond à l'activation du fluage dans l'agrégat ;
- une stabilisation lors du palier à puissance linéique maximale.

Ce résultat se vérifie logiquement par le tracé des distributions de pressions hydrostatiques intragranulaires moyennes, présenté à la figure 9.7 pour différents instants de la simulation n_1 . Observons toutefois que les écarts entre extrema de la distribution sont de l'ordre de 10% de la valeur effective.

Nous reviendrons plus en détail sur les conclusions qui peuvent être tirées de ces résultats au paragraphe 9.3.3. Signalons dès à présent que la description statistique des distributions de contraintes locales proposée ici pourra être utilisée pour enrichir l'hypothèse de grain moyen, utilisée actuellement pour l'étude du comportement des produits de fission.

Après avoir analysé l'évolution de la pression hydrostatique moyenne dans les grains, le paragraphe suivant est consacré aux gradients de pression hydrostatique intragranulaire.

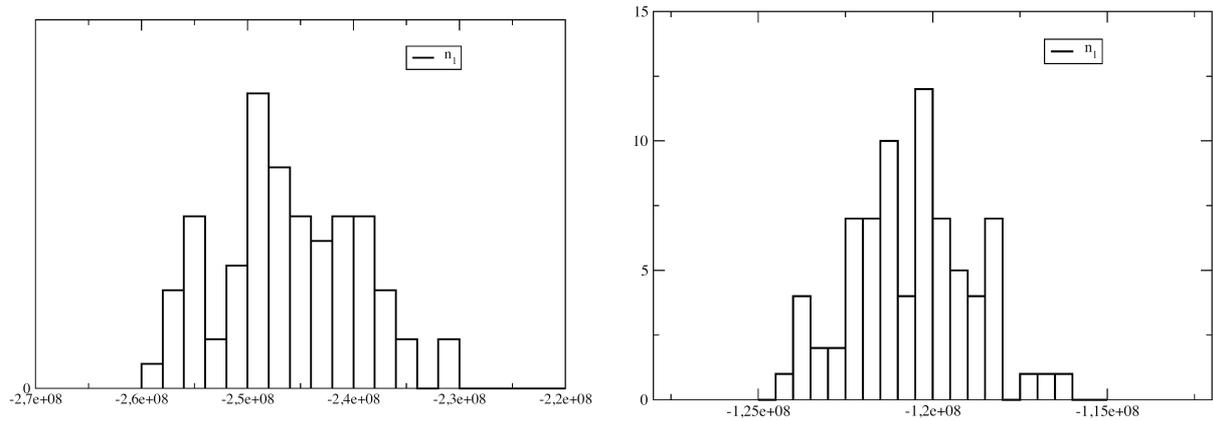


FIGURE 9.7 – Distribution de pression hydrostatique intragranulaire moyenne : milieu de rampe (à gauche) et fin de simulation (à droite), calcul n_1 au centre de la pastille

9.3.1.2 Localisation intragranulaire

Du fait des difficultés numériques mentionnées au chapitre 6 concernant la prise en compte de l'incompressibilité dans la méthode des éléments finis, l'analyse proposée ici se limite à quelques éléments de description qualitative des distributions de pression hydrostatique intragranulaire.

La courbe 9.8, qui présente l'évolution temporelle de la moyenne des écart-types intragranulaires, montre que l'amplitude des gradients de pression intragranulaire reste faible au cours de la simulation.

Ce résultat, bien entendu, était assez prévisible en regard des distributions de pression hydrostatiques intragranulaires moyennes présentées au paragraphe précédent. Toutefois il est intéressant de remarquer que, contrairement à celles-ci, les gradients intragranulaires augmentent tout au long de la simulation, y compris lorsque la pression hydrostatique effective diminue par relaxation.

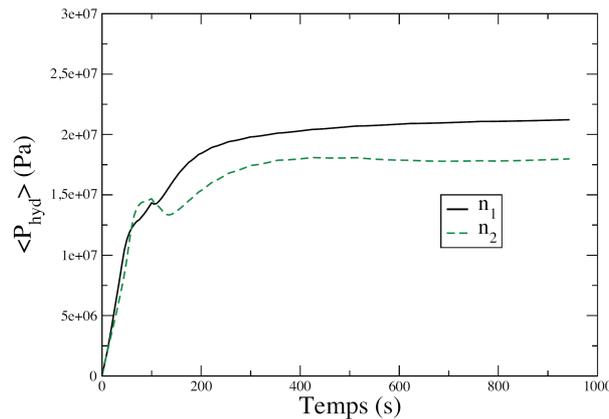


FIGURE 9.8 – Evolution de la moyenne de l'écart-type sur la distribution de pressions hydrostatiques intragranulaires $\overline{P_{hyd}^g}$ au cours du temps. Cas des simulations n_1 (courbe noire) et n_2 (courbe verte)

Le tracé d'isovaleurs présenté à 9.9 révèle par ailleurs que les gradients de pression hydrostatique se concentrent principalement au voisinage des joints de grains, du fait de l'incompatibilité de comportement entre grains voisins. Ces observations pourront être confirmées lors de l'étude du

comportement intergranulaire, qui sera présentée au paragraphe suivant. Notons aussi que malgré la faible hétérogénéité du champ de pression hydrostatique sur l'ensemble du VER, des écarts de l'ordre de 50 MPa peuvent être observés dans les grains.

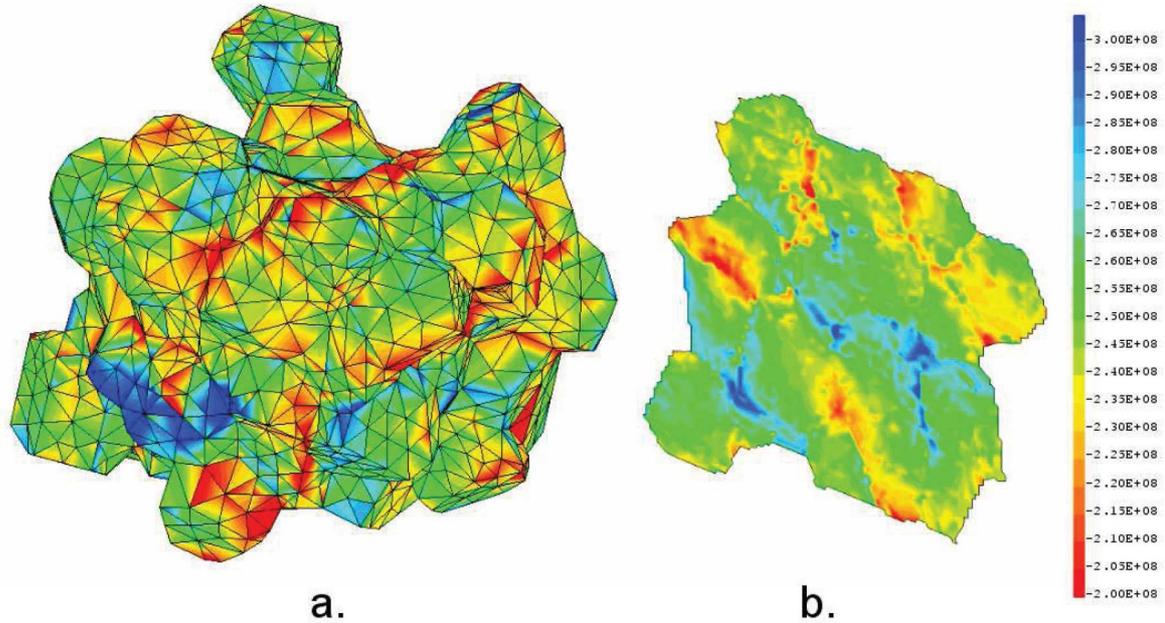


FIGURE 9.9 – Isovaleurs de pression hydrostatique intragranulaire au cours de la montée en rampe : cas de la simulation n_1 au centre de la pastille. Agrégat (a.) et vue en coupe (b.)

9.3.2 Comportement intergranulaire

L'analyse du comportement des joints de grains est réalisée selon deux axes principaux : la pression hydrostatique, qui pilote l'évolution des cavités intergranulaire d'une part, et la contrainte normale aux joints de grains, qui contrôle l'apparition de la décohésion d'autre part.

9.3.2.1 Pression hydrostatique intergranulaire

Les distributions de pression hydrostatiques moyennes aux joints de grains, calculées au cours de la montée en rampe et représentées à la figure 9.10, mettent une nouvelle fois en évidence la faible dispersion autour de la valeur effective (typiquement de l'ordre de 150 MPa). Dans le cas de la simulation n_2 , le rapport entre l'écart-type sur la distribution de pression aux joints de grains et la valeur moyenne $\frac{\langle \bar{P}_{hyd}^{jdg} \rangle}{\bar{P}_{hyd}} \simeq 8.6\%$; cette valeur tombe à 4.9% pour la simulation n_1 , pour laquelle la sollicitation effective en pression est encore plus contraignante. Ces valeurs restent supérieures à celles observées pour les distributions de pression hydrostatique moyenne par grain.

9.3.2.2 Contrainte normale aux joints de grains

Concernant les phénomènes de décohésion intergranulaire, il faut rappeler ici que du fait de la définition du chargement retenue à l'équation (9.3), la partie périphérique de la pastille est dans

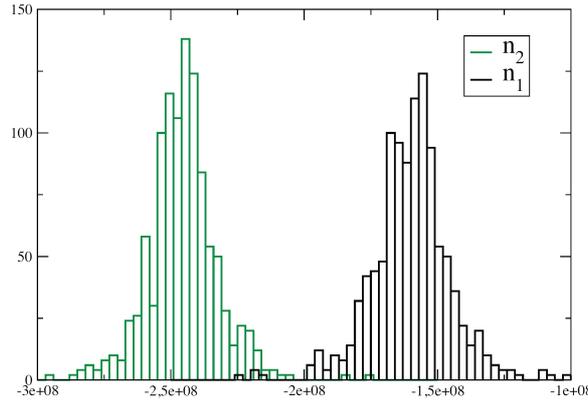


FIGURE 9.10 – Distribution de pression hydrostatique moyenne aux joints de grains au cours de la montée en rampe : cas de la simulation n_1 (noir) et n_2 (vert).

un état de macro-fissuration lors de la montée en rampe.

La déformation due à la fissuration $\tilde{\varepsilon}^{fis}$ n'étant pas imposée à l'agrégat, nous ne nous attendons pas à observer des contraintes de traction aux joints de grains suffisamment importantes pour mener à la rupture complète de l'agrégat, mais simplement à des phénomènes d'endommagement localisés.

Remarquons encore que, toujours selon des considérations de chargement macroscopique sur l'agrégat, la représentation des distributions de contraintes normales aux joints de grains est moins aisée que dans les simulations présentées aux chapitres précédents. Si, dans le cas d'une sollicitation uniaxiale, chaque joint de grain pouvait être identifié par le produit scalaire $\mathbf{n} \cdot \mathbf{O}_i$ entre sa normale et l'axe du chargement, ce "repérage" par un scalaire n'est plus suffisant dans le cas d'une rampe de puissance où la sollicitation est multiaxiale. Nous nous proposons donc de comparer les résultats de simulation à une distribution de contraintes normales analytique aux joints de grain σ_n^{al} , correspondant à un agrégat homogène (pour lequel $\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\Sigma}$) et définie sous la forme suivante :

$$\sigma_n^{al} = \boldsymbol{\Sigma} : \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} \quad (9.13)$$

La figure 9.11 présente la comparaison entre la distribution associée à cette valeur analytique et celle issue de la simulation, calculées lors de la montée en rampe pour les simulations n_1 et n_2 . Afin de faciliter l'analyse de ces résultats, les zones à ± 50 MPa par rapport à la valeur analytique ont été délimitées par les droites en pointillé orange.

Quelques observations peuvent être tirées des résultats obtenus :

- d'un part, les valeurs numériques obtenues montrent que la probabilité d'apparition de phénomènes de décohésion intergranulaire est faible, puisque tous les joints de grains présents dans l'agrégat sont très nettement en compression ;
- par ailleurs, si la dispersion entre la distribution simulée et la distribution analytique reste généralement faible (de l'ordre de 15 MPa) relativement aux valeurs de contraintes normales elles-mêmes, nous observons localement des écarts significatifs (proches de la centaine de MPa) entre les extrema de la distribution.

Nous reviendrons au paragraphe suivant sur les conclusions à apporter à l'analyse des distributions de contraintes locales présentées ici. En particulier, il reste à discuter de l'impact du comportement micromécanique du combustible sur le transport des produits de fission et sur les perspectives offertes par cette approche polycristalline pour enrichir le modèle de grain moyen utilisé par les codes tels que MARGARET.

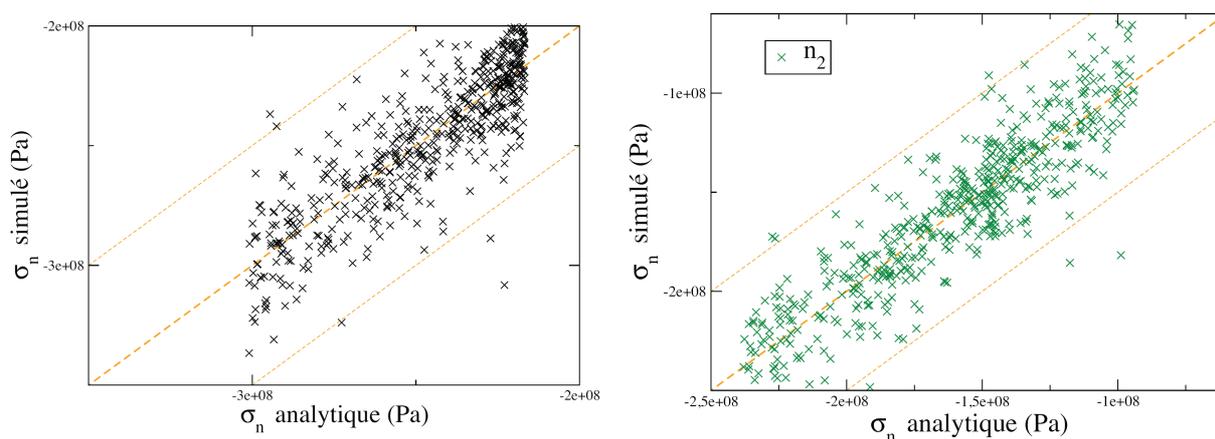


FIGURE 9.11 – Distribution de contrainte normale moyenne aux joints de grains au cours de la montée en rampe : cas de la simulation n_1 (noir) et n_2 (vert).

9.3.3 Approche micromécanique et couplage multi-physique : bilan

Les résultats présentés aux paragraphes précédents permettent de tirer une première série de conclusions concernant les apports de l’approche micro-mécanique pour la modélisation du comportement du combustible en rampe de puissance.

9.3.3.1 Apport de la modélisation micromécanique pour le modèle de “grain moyen”

Comme nous l’avons vu au chapitre 2, les codes dédiés à la modélisation des phénomènes de transport des produits de fission (tels que MARGARET) font appel à un modèle de “grain moyen”, qui sert de cadre à la résolution du problème. Le couplage entre thermo-mécanique et physico-chimie se fait notamment par le biais de ce grain moyen, auquel s’applique la pression hydrostatique issue du calcul ALCYONE.

La caractérisation statistique des distributions de contraintes locales dans le VER présentée dans ce chapitre pourra servir à enrichir ce modèle de “grain moyen”. Pour un niveau de pression hydrostatique effective donné, il est en effet possible d’interpréter les hétérogénéités du champ de contraintes dans le polycristal en définissant un modèle probabiliste pour la pression hydrostatique dans le grain moyen. Par ailleurs, la possibilité de différencier les contraintes intra- et intergranulaire pourrait elle aussi permettre de raffiner la modélisation des phénomènes de transports proposée par les codes actuels.

9.3.3.2 Résultats obtenus dans le cadre de cette étude

Au centre de la pastille, la déformation se produit essentiellement sous forme de fluage. La modélisation du polycristal d’ UO_2 proposée dans cette thèse étant principalement axée sur une description de ces mécanismes de déformation à l’échelle micromécanique, il n’est pas surprenant que notre modèle parvienne à reproduire de manière satisfaisante la réponse des lois macroscopiques utilisées dans ALCYONE.

Du fait du caractère hydrostatique prononcé des sollicitations dans cette zone de la pastille, les distributions de contraintes locales dans l’agrégat sont assez homogènes : les écart-types calculés ne dépassent pas 10% de la contrainte effective. Du fait de l’incompatibilité intergranulaire, les phénomènes de localisations se concentrent principalement au voisinage des joints de grains.

Les conclusions sont différentes dans le cas des simulations n_3 et n_4 , dans la partie extérieure de la pastille. Dans cette zone, le comportement du combustible est principalement élastique-fragile et notre modélisation polycristalline ne parvient pas à reproduire le comportement effectif de l' UO_2 . Plusieurs éléments peuvent expliquer cette situation :

- Nous ne disposons pas de mesures expérimentales de l'évolution des paramètres élastiques monocristallins avec la température. Nous avons défini au paragraphe 9.1.2 un jeu de paramètres basé sur l'identification du comportement élastique sphérique de la pastille dans ALCYONE, mais les valeurs retenues ne sont pas représentatives en termes de comportement déviatorique.
- la modélisation 1D dans ALCYONE fait appel à des hypothèses d'axisymétrie et de déformation planes généralisées qui limitent l'analyse du comportement des zones fissurées. Du fait de ces hypothèses, chaque fissure radiale (dans le plan (O_{rz}) , défini par l'axe de symétrie et la direction radiale) ou axiale (dans le plan $(O_{r\theta})$, perpendiculaire à l'axe de symétrie) correspond respectivement à une perte de rigidité du matériau dans les directions orthoradiale et axiale. La déformation effective appliquée au VER est directement affectée par ces simplifications.

Le prochain paragraphe sera notamment l'occasion de revenir sur ce dernier point, en envisageant la mise en oeuvre de notre modèle polycristallin en soutien d'une simulation ALCYONE 3D.

De façon générale, rappelons qu'un certain nombre de phénomènes n'ont pas été pris en compte dans le modèle d'agrégat. C'est le cas de la décohésion intergranulaire, qui peut-être favorisée pendant l'irradiation par la mise en traction des joints de grains due à la présence de produits de fission dans les cavités intergranulaires. La modélisation de l'effet de l'irradiation sur le fluage intragranulaire n'a été introduite que d'un point de vue macroscopique, à travers la déformation effective imposée au VER. En toute rigueur, cet effet devrait être intégré à directement à la loi de fluage micro-mécanique, comme nous l'avons signalé au paragraphe 4.3.4.

9.3.3.3 Modélisation 3D de la pastille : effets de structures et modèle polycristallin

Faute de temps, nous n'avons pas été en mesure d'étendre notre étude au cas d'une simulation 3D du comportement de la pastille d' UO_2 au cours d'une rampe d'irradiation. Cette approche nous permettrait d'étudier l'apport du modèle polycristallin dans certaines zones localisées de la pastille, soumises à des sollicitations particulières.

Les problèmes liés à la modélisation de la fissuration radiale et axiale dans le cas 1D ont déjà été décrits au paragraphe précédent. L'utilisation du modèle d'agrégat dans le cadre d'une modélisation 3D du fragment de pastille (dont les caractéristiques sont illustrées à la figure 9.12) permettrait d'analyser les contraintes micromécaniques au sein des fragments délimités par des fissures macroscopiques, et leur impact sur le relâchement des produits de fission gazeux. Par ailleurs, la mise en oeuvre d'éléments cohésifs, telle que présentée au chapitre 8, permettrait dans l'idéal de retrouver non seulement la macro-fissuration du polycristal, mais aussi des phénomènes de micro-endommagement aux joints de grains qui échappent à notre modélisation actuelle.

L'étude de l'évidement de la pastille (en orange sur la figure 9.12) constitue une perspective intéressante pour la mise en oeuvre du modèle d'agrégat, dans la mesure où le taux de triaxialité de la contrainte est beaucoup plus faible dans cette zone que dans la partie centrale de la pastille. En effet, la contrainte normale sur la surface externe de l'évidement, qui est du même ordre de grandeur que la pression interne du crayon (25 bars), est très faible par rapport aux autres composantes de la contrainte.

Le chapitre 5 a mis en évidence l'importante hétérogénéité des champs de contraintes pour

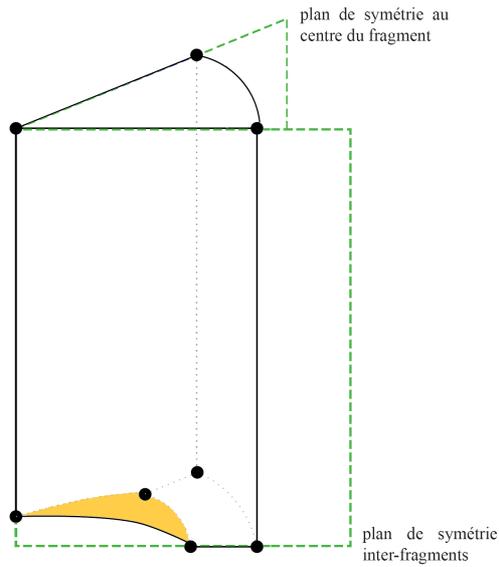


FIGURE 9.12 – Modélisation 3D de la pastille dans ALCYONE : plans de symétrie et de fissuration (en vert) et évidement (en orange).

un agrégat soumis à une compression uniaxiale. L'évidement étant dans une situation similaire³, il est vraisemblable que le même type d'hétérogénéité soit observé dans cette zone. De la même manière que pour les essais en compression uniaxiale présentés au chapitre 8, des phénomènes de micro-endommagement sous irradiation ont d'ailleurs été mis en évidence dans cette zone de la pastille, et pourraient être modélisés à l'échelle de l'agrégat.

3. En toute rigueur, il se trouve en réalité dans un état de traction biaxée.

Conclusions et perspectives

Le comportement du combustible UO_2 , utilisé dans les Réacteurs à Eau Pressurisée, a fait l'objet d'une littérature abondante. La problématique industrielle qui motive ces travaux de recherche est l'Interaction Pastille-Gaine (IPG), qui peut provoquer la rupture de la gaine en situation incidente. A l'origine de ce phénomène, le couplage entre les contraintes (principalement d'origine thermique) et le gonflement généré par l'accumulation de produits de fissions gazeux pilote le comportement de la pastille.

La modélisation de ces phénomènes fait appel à une approche multi-échelles, multi-physiques du comportement de l' UO_2 . Les codes de calculs développés au CEA décrivent le problème mécanique à l'échelle de la structure (du crayon combustible jusqu'au fragment de pastille, selon la finesse de la modélisation) tandis que le transport des produits de fissions est évalué sur un "grain moyen", défini comme une représentation moyenne (au sens probabiliste) des propriétés de la microstructure polycristalline du combustible .

Le travail présenté dans ce mémoire s'inscrit dans une démarche d'amélioration de la compréhension du couplage entre le comportement thermo-mécanique et la physico-chimie relative aux produits de fissions gazeux dans le combustible sous irradiation. Le développement de modèles à l'échelle de la microstructure vise à offrir un cadre commun pour la description de l'ensemble de ces phénomènes, de façon à décrire in fine leur interaction de façon plus rigoureuse.

Dans cette optique, ce travail de thèse avait pour objectif principal de développer les outils nécessaires à la modélisation du polycristal d' UO_2 . Un des enjeux de cette étude était la modélisation du fluage thermique du combustible à l'échelle de l'agrégat polycristallin, en tenant compte d'informations issues de la caractérisation microstructurale du matériau.

La représentation du polycristal a été abordée à travers deux formalismes : une approche à champ moyen (basée sur la formulation auto-cohérente), et une approche à champ complet, faisant appel à une description morphologique du polycristal basée sur la mosaïque de Voronoï. La possibilité d'analyser les gradients de contraintes intragranulaires, et plus encore le comportement des joints de grains, sont des atouts indéniables de cette deuxième approche par rapport à une modélisation à champ moyen, qui offre moins de possibilités pour évaluer les effets de localisation dans les grains. Les propriétés morphologiques de la mosaïque de Voronoï sont comparables à celles du polycristal de dioxyde d'uranium en l'absence de porosités. Les premières observations réalisées en termes de distributions de tailles de grains et de nombre de voisins montrent un accord qualitatif satisfaisant entre les mesures expérimentales et la modélisation. Ces résultats devront être confirmés par une étude plus complète, et la mise en oeuvre de critères géométriques lors de la génération du Volume Élémentaire Représentatif permettra d'améliorer sa représentativité morphologique.

Nous avons développé une loi de comportement monocristalline en introduisant des propriétés microstructurales qui sont à l'origine des hétérogénéités de contraintes locales dans l'agrégat. La connaissance expérimentale des propriétés élastiques du monocristal nous a permis de mener une première étude de la représentativité du VER, dont les résultats montrent que cent à deux cent

grains sont nécessaires pour retrouver l'isotropie effective du matériau. Un premier modèle de plasticité cristalline, baptisé PC_U , a été développé en faisant appel aux éléments connus en matière de caractérisation expérimentale des systèmes de glissement de dislocations (orientations de ces systèmes, et évolution cissions critiques résolues avec la température) dans l' UO_2 . Ce modèle ne permettant pas de simuler le fluage du combustible sur l'ensemble de la gamme de sollicitations thermo-mécaniques rencontrée pendant une irradiation en rampe de puissance, nous avons proposé une deuxième loi de comportement, nommée ld_2 , et qui intègre un mécanisme de fluage par diffusion de lacunes sous contrainte. L'identification des paramètres de ces modèles a été réalisée en comparant successivement le comportement effectif du VER à des essais expérimentaux sur pastilles et à la réponse de modèles de comportement macroscopiques validés sur une large base expérimentale et utilisés dans les codes actuels. Nous avons ainsi pu démontrer la capacité de notre modèle à reproduire les deux régimes de fluage de l' UO_2 (pilotés respectivement par la diffusion de lacunes et par les mouvements de dislocations) et le pic de compression observés expérimentalement. En termes de validation à l'échelle de la microstructure, nous avons proposé une comparaison entre les densités de dislocations mesurées expérimentalement avec celles issues de la simulation. Nous avons aussi développé un modèle de zones cohésives pour la prise en compte de la décohésion intergranulaire observée expérimentalement lors d'essais en compression uniaxiale.

Les premières analyses de l'hétérogénéité du champ de contrainte dans le VER ont été l'occasion d'étudier la sensibilité numérique de notre modèle. Si les résultats obtenus montrent que, conformément à la littérature, la réponse effective de l'agrégat est peu sensible au choix du maillage, il n'en va pas de même pour les contraintes locales. C'est notamment le cas de la pression hydrostatique intragranulaire, qui est affectée par l'effet checkerboard, bien connu pour l'étude d'écoulements incompressibles. Cet effet, qui correspond à la présence de modes de pression parasites, est dû à la prise en compte du caractère incompressible du fluage thermique dans la méthode des éléments finis. Une étude de sensibilité révèle que les éléments quadratiques sont les mieux adaptés pour l'estimation des contraintes locales dans le polycristal, puisqu'ils permettent d'obtenir des résultats similaires à ceux obtenus avec des maillages d'éléments linéaires même avec un raffinement tel que le nombre de degrés de liberté total soit plus réduit. Les résultats présentés dans ce mémoire laissent à penser que quelques centaines d'éléments par grains sont suffisants pour obtenir une estimation correcte des pressions hydrostatiques moyennes par grains. L'analyse des gradients de contraintes intragranulaires est par contre compliquée par la présence des modes de pression évoqués précédemment.

Le calcul des contraintes aux joints de grains a fait l'objet de développements spécifiques. La difficulté, souvent rencontrée dans le domaine des composites (pour lequel la contrainte interfaciale joue un rôle central), réside dans l'extrapolation du champ de contraintes initialement connu aux points d'intégration des éléments finis. Différentes méthodes issues de la littérature ont été mises en oeuvre, et leur validité a été débattue en termes de respect de la loi de comportement du matériau et de l'équilibre mécanique. De ce point de vue, l'utilisation de zones cohésives élastiques et la reconstruction du champ de vecteur contrainte à partir de la formulation faible de l'équilibre semblent les méthodes les mieux adaptées.

Une première validation de notre modèle d'agrégat a été proposée à travers la simulation de la décohésion intergranulaire lors d'essais de compression uniaxiale sur combustible vierge. Bien que cette étude ait été limitée par des difficultés techniques (en particulier, des problèmes de convergence numérique), les niveaux d'ouverture aux joints de grains ont pu être comparés aux mesures expérimentales. Notre modèle, destiné à représenter un mécanisme de fissuration instantané piloté par une contrainte seuil, n'est pas suffisant pour représenter complètement l'ensemble des phénomènes liés à la décohésion. C'est notamment le cas de l'endommagement différé par cavitation. Les simulations ont par ailleurs montré la capacité de ce modèle à représenter d'autres

caractéristiques des profils de fissurations expérimentaux, comme l’amorçage des fissures aux joints triples.

Enfin, nous avons analysé le comportement micromécanique du combustible en réacteur. Cette étude a été menée en reconstruisant un chargement thermo-mécanique pour l’agrégat à partir des résultats d’une simulation 1D du comportement du plan médian-pastille réalisée avec le code ALCYONE. L’accord entre le comportement effectif du VER et le calcul ALCYONE a servi de vérification pour notre modèle d’agrégat. Dans la zone centrale de la pastille, où le combustible est dans une situation de compression hydrostatique, les distributions de contraintes locales sont assez homogènes. Les simplifications associées à la modélisation 1D dans ALCYONE ne permettent pas d’analyser les contraintes locales dans la partie fissurée en périphérie de la pastille. En l’état, l’analyse statistique de l’hétérogénéité des champs de contraintes locales pourra servir à définir un modèle probabiliste destiné à enrichir l’approche de “grain moyen” utilisée pour le calcul du relâchement des produits de fission. La possibilité de distinguer les contraintes intragranulaires et aux joints de grains dans les codes de physico-chimie permettra de faire diminuer le caractère empirique du couplage avec le comportement thermo-mécanique du combustible. La mise en oeuvre de simulations polycristallines en parallèle d’un calcul ALCYONE 3D pourrait permettre de compléter cette étude, en caractérisant certaines zones soumises à des sollicitations particulières. C’est le cas de l’évidement de la pastille, qui est soumis à une contrainte dont le taux de triaxialité est plus faible que celui rencontré au centre de la pastille. De fait, il est vraisemblable que l’hétérogénéité du champ de contraintes local dans cette zone soit du même ordre que celle observée pour les simulations d’essais de compression uniaxiale, et supérieure à celle rencontrée au plan médian-pastille.

Plusieurs perspectives sont offertes pour poursuivre le développement de cette approche micromécanique. La prise en compte des différentes populations de cavités (bulles et pores de fabrication), est indispensable pour améliorer la représentativité morphologique du VER. Au-delà de ces seules considérations morphologiques, ces cavités modifient les propriétés de diffusion du combustible, et lui confèrent un caractère compressible en régime visco-plastique.

Du fait des difficultés associées à l’étude de matériau radioactifs, les effets de l’irradiation sur le comportement mécanique de l’ UO_2 sont à l’heure actuelle mal connus. Quelques pistes ont pu être proposées dans ce mémoire pour décrire le mécanisme de fluage d’irradiation, ainsi que l’effet de l’irradiation sur le fluage thermique à l’échelle du polycristal, en s’inspirant notamment de la modélisation de cet effet sur la densité de dislocation proposée dans les codes de physico-chimie. Il convient aussi de prendre en compte l’évolution de la microstructure liée à l’accumulation de produits de fissions : gonflement des cavités, mise en traction des joints de grains, voire restructuration à fort taux de combustion. Ces phénomènes, déjà modélisés dans les codes de physico-chimie tels que MARGARET devraient à terme être intégrés au modèle polycristallin. Le fait de traiter ces différents aspects au sein d’un formalisme commun permettra de mieux comprendre l’effet du comportement micromécanique sur le relâchement des produits de fission gazeux.

Bien entendu, ce travail de modélisation nécessite d’approfondir en parallèle la caractérisation expérimentale du comportement micromécanique de l’ UO_2 . La connaissance des mécanismes de déformation à l’échelle du monocristal est l’un de ces impératifs, en particulier en ce qui concerne la contribution des mouvements de montée de dislocations à la déformation viscoplastique. Le pic de contrainte en compression, observé expérimentalement pour des essais de Déformation à Vitesse Constante sur pastilles d’ UO_2 , a été associé dans notre modèle à l’évolution de la densité de dislocations dans le cristal. Des essais sur monocristaux permettraient de vérifier la validité de cette hypothèse, fréquemment citée pour la modélisation de matériaux à faible densité de dislocations initiale. Il sera aussi nécessaire de caractériser la dépendance des paramètres élastiques du monocristal (pour lesquels nous n’avons eu accès qu’à des valeurs mesurées à 25°C) à la température afin de

mettre en oeuvre le modèle polycristallin dans la partie externe de la pastille, dont le comportement est élastique-fragile. L'analyse par EBSD des distributions d'orientations cristallographiques permettrait d'améliorer la représentativité du modèle polycristallin que nous avons développé. Les effets de l'irradiation sur le comportement micromécanique du combustible devront aussi d'une caractérisation expérimentale plus complète en soutien du travail de modélisation.

Les approches aux très petites échelles, depuis les simulations *ab initio* jusqu'aux calculs en dynamique des dislocations, pourraient elles aussi contribuer à enrichir la description du comportement de l'agrégat, et à terme, améliorer la compréhension du couplage entre les phénomènes relatifs à la thermo-mécaniques et ceux liés au transport des produits de fission.

Bibliographie

- [Ahsby 73] AHSBY M. F. et VERRALL R.A. *Diffusion accomodated flow and superplasticity*. Acta Metallurgica, 1973, vol 21, p 149–163.
- [Alamo 78] ALAMO A., LEFEBVRE J.M. et SOULLARD J. *Déformation plastique du bioxyde d'uranium : observation des sous-structures de dislocations*. JNM, octobre 1978, vol 75.
- [Alexander 68] ALEXANDER H. et HAASEN P. *Dislocation and plastic flow in the diamond structure*. Solid structures Physics, 1968.
- [Ashby 82] ASHBY FROST. *Deformation-mechanisms maps*. Pergamon Press, London, 1982.
- [Askes 99] ASKES H., D BORST R. et HEERES O. *Conditions for locking-free elasto-plastic analyses in the Element-free Galerkin method*. Computational methods applied to Mechanical Engineering, octobre 1999, vol 173, p 99–109.
- [Aurenhammer 96] AURENHAMMER F. et KLEIN R. *Voronoi diagrams*, 1996.
- [Balland 07] BALLAND J. *Simulation expérimentale des effets de l'irradiation sur le comportement thermomécanique du combustible UO_2 : impact des produits de fission solides et gazeux*. Thèse : Ecole Nationale Supérieure des Mines de Saint-Etienne, 2007.
- [Barbe 01] BARBE F., DECKER L., JEULIN D. et CAILLETAUD G. *Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregate -Part 1 : F.E. Model*. International journal of plasticity, 2001, vol 17.
- [Barber 96] BARBER C.D., DOBKIN D.P. et HUHDANPAA H.T. *The Quickhull algorithm for convex hulls*, ACM Trans. Mathematical Software, december 1996.
- [Barrett 65] BARRETT C.R. et NIX W.D. *A model for steady state creep based on the motion of jogged screw dislocations*. Acta metallurgica, 1965, vol 13, p 1247–1258.
- [Bourgeois 06] BOURGEOIS S. et DÉBORDES O. *Comportement mécanique des tissés, chapitre 4 : Homogénéisation périodique*. Hermes, 2006.
- [Brenner 02] BRENNER R., MASSON R., CASTELNAU O. et ZAOUI A. *A "quasi-elastic" affine formulation for the homogenised behaviour of nonlinear viscoelastic polycrystals and composites*. European Journal of Mechanics A/Solids, 2002, vol 21, p 943–960.
- [Brucklacher 72] BRUCKLACHER D. et DIENST W. *Creep behavior of ceramic nuclear under neutron irradiation*. JNM, 1972, vol 42, p 285.
- [Bruggi 08] BRUGGI M. *On the solution of the checkerboard problem in mixed-FEM topology optimization*. Computers and structures, 2008, vol 86, p 1819 – 1829.
- [Bénard 84] BÉNARD J., MICHEL A., PHILIBERT J. et TALBOT J. *Métallurgie générale*. Masson, 1984.
- [Castelier 07] CASTELIER E. *Homogénéisation des propriétés thermoélastiques des combustibles CERMET*. NT CEA/DEN/DEC/SESC/LSC n° 07-022, fÃ©vrier 2007.
- [Chapron 97] CHAPRON , DUGUAY , MOCELLIN et DEHAULT . *Programme Flox. Loi de fluage stationnaire de l' UO_2 non dopé et de l' UO_2 dopé à l'oxyde de chrome au-delà de la limite de solubilité : recommandations*. CEA/DTP/SECC/LPCC/NT/97057A, 1997.
- [Charollais 97] CHAROLLAIS F. *Analyse d'images, un outil pour caractériser et modéliser la microstructure du combustible MOX*. Thèse : Université de Caen, 1997.

- [Chen 95] CHEN D.J., SHAH D.K. et CHAN W.S. *Interfacial stress estimation using least-square extrapolation and local stress smoothing in laminated composites*. Computers and structures, 1995, vol 58.
- [Chiumenti 04] CHIUMENTI M., VALVERDE Q., A. D SARACIBAR C. et CERVERA M. *A stabilized formulation for incompressible plasticity using linear triangles and tetrahedra*. International Journal of Plasticity, 2004, vol 20, p 1487–1504.
- [Clough 70] CLOUGH D. J. *Irradiation-induced creep of uranium dioxide, Meeting on fast reactor fuel and fuel elements*. GFK, Karlsruhe, 1970.
- [Coble 63] COBLE R.L. *A model for boundary diffusion controlled creep in polycrystalline materials*. Journal of Applied Physics, 1963, vol 34, p 1679–1682.
- [Colin 03] COLIN C. *Etude du fluage du dioxyde d'uranium : Caractérisation par essais de flexion et modélisation mécanique*. Thèse : Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2003.
- [Coster 02] COSTER M. et CHERMANT J.L. *On a way to material models for ceramics*. Journal of the European Ceramic Society, 2002, vol 22, p 1191–1203.
- [De Bonnières 09] DE BONNIÈRES P., DEBRUYNE G., EL-GHARIB J., PROIX J.M. et DIARD O. *Génération et calcul d'agrégats multi-cristallins dans Code Aster*. Présentation du EDF R&D, 2009.
- [Dherbey 00] DHERBEY F. *Déformation à chaud du dioxyde d'uranium polycristallin : des mécanismes microscopiques au comportement macroscopique*. Thèse : Institut National Polytechnique de Grenoble, 2000.
- [Dherbey 02] DHERBEY F., LOUCHET F., MOCELLIN A. et LECLERCQ S. *Elevated temperature creep of polycrystalline uranium dioxide : from microscopic mechanisms to macroscopic behaviour*. Acta Materiala, 2002, vol 50, p 1495–1505.
- [Diard 01] DIARD O. *Un exemple de couplage, comportement-endommagement-environnement, dans les polycristaux. Application à l'Interaction Pastille-Gaine*. Thèse : Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2001.
- [Duvaut 82] DUVAUT G. et PISTRE F. *Calcul des vecteurs contraintes en approximation P_1 et P_2* . C.R. Acad. Sc. Paris, 295, Série II, 1982.
- [Espinosa 00] ESPINOSA H.D., DWIVEDI S. et LU H.C. *Modeling impact induced delamination of woven fiber reinforced composites with contact/cohesive laws*. Comput. Meth. APpl. Mech. Engng, 2000, vol 183, p 259–290.
- [Estrin 84] ESTRIN Y. et MECKING H. *A unified phenomenological description of work hardening and creep based on one-parameter models*. Acta. Metall., 1984, vol 32, p 57–70.
- [Evans 69] EVANS A.G. et PRATT P.L. *Dislocations in the fluorite structure*. Philosophical Magazine, 1969, vol 20, p 1213–1237.
- [Franciosi 84] FRANCIOSI P. *Étude théorique et expérimentale du comportement élastoplastique des monocristaux métalliques se déformant par glissement : modélisation pour un chargement complexe quasi statique*. Thèse : Université Paris-Nord I, 1984.
- [François 92] FRANÇOIS D., PINEA A. et ZAOUI A. *Elasticité et plasticité*. Hermes, Paris, 1992.
- [Fritzen 09] FRITZEN F., BÖHLKE T. et SHNACK E. *Periodic three-dimensional mesh generation for crystalline aggregate based on Voronoï tessellations*. Comput. Mech., 2009, vol 43, p 701–713.
- [Gaffard 05] GAFFARD V., GOURGUES-LORENZON A. F. et BESSON J. *High temperature creep flow and damage properties of 9Cr1MoNbV steels : Base metal and weldment*. Nuclear Engineering and Design, december 2005, vol 235, p 2547–2562.
- [Garcia 01] GARCIA P. et LOUCHE V. *Modélisation mono-dimensionnelle du comportement mécanique du crayon combustible : spécifications physiques du problème*. NT CEA/DEC/SESC/LLCC 99-2001, juin 2001.

BIBLIOGRAPHIE

- [Garcia 02] GARCIA P., STRUZIK C., AGARD M. et LOUCHE V. *Mono-dimensional mechanical modelling of fuel rods under normal and off-normal operating conditions*. Nuc. Engng and Design, 2002, vol 206, p 183–201.
- [Gatt 05] GATT J.M. *Comportement thermomécanique du combustible sous irradiation*. NT CEA/DEC/SESC/LSC 04-005, 2005.
- [Gazis 63] GAZIS D. C., TADJBAKHSI I. et TOUPIN R.A. *The elastic tensor of given symmetry nearest to an anisotropic elastic tensor*. Acta Cryst., 1963, vol 16, p 917–922.
- [Guérin 85] GUÉRIN Y. *Le comportement mécanique du combustible nucléaire sous irradiation*, 1985.
- [Gérard 08] GÉRARD C. *Mesures de champs et identifications de modèles de plasticité cristalline*. Thèse : Université de Paris 13, 2008.
- [Helfer 06] HELFER T. *Étude de l'impact de la fissuration des combustibles nucléaires oxyde sur le comportement normal et incidentel des crayons combustible*. Thèse : Ecole Centrale Lyon, 2006.
- [Hinton 74] HINTON E. et CAMPBELL J.S. *Local and global smoothing of discontinuous finite element functions using a least squares method (applications to structural analysis)*. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 1974, vol 8.
- [Julien 08] JULIEN J. *Modélisation multi-échelles du couplage physico-chimie - mécanique du comportement du combustible à haute température des réacteurs à eau sous pression*. Thèse : Université de Provence - Aix-Marseille I, 2008.
- [Kanit 03] KANIT T. *Notion de Volume Élémentaire Représentatif pour les Matériaux Hétérogènes : Approche Statistique et Numérique*. Thèse : Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, mai 2003.
- [Kassner 03] KASSNER M.E. et HAYES T.A. *Creep cavitation in metals*. International Journal of Plasticity, 2003, vol 19, p 1715–1748.
- [Lebensohn 08] LEBENSOHN R.A., BRENNER R., CASTELNAU O. et ROLLET A.D. *Orientation image-based micromechanical modelling of subgrain texture evolution in polycrystalline copper*. Acta materialia, 2008, vol 56, p 3914–3926.
- [Lebensohn 09] LEBENSOHN R.A., HARTLEY C.S., TOME C.N. et CASTELNAU O. *Modelling the mechanical response of polycrystals deforming by climb-and-glide*. Philosophical Magazine, 2009, vol 90, p 567–583.
- [Lemaitre 85] LEMAITRE et CHABOCHE . *Mécanique des solides*. Dunod, 1985.
- [Maillard 08] MAILLARD S. et RAVENET A. *Apport d'une analyse au niveau atomique des mécanismes de déformation des combustibles nucléaires*. NT CEA/DEN/DEC/SESC/LLCC 2008, 2008.
- [Masson 98] MASSON R. *Estimations non linéaires du comportement global de matériaux hétérogènes en formulation affine - application aux alliages de zirconium*. Thèse : Ecole Polytechnique, 1998.
- [Masson 99] MASSON R. et ZAOUÏ A. *Self-consistent estimates for the rate-dependent elastoplastic behavior of polycrystalline materials*. Journal of Mech. Phys. Solids, 1999, vol 47, p 1543–1568.
- [Michel 04] MICHEL B. *Formulation of a new intergranular creep damage model for austenitic stainless steels*. Nuclear Engineering and Design, january 2004, vol 227, p 161–174.
- [Michel 11] MICHEL B., SERCOMBE J., NONON C. et FANDEUR O. *Comprehensive nuclear materials*. elsevier, 2011. À paraître.
- [Monerie 00] MONERIE Y. *Fissuration des matériaux composites : rôle de l'interface fibre/matrice*. Thèse : Université Aix-Marseille II, 2000.
- [Monerie 06] MONERIE Y. et J.M. GATT. *Overall viscoplastic behavior of non-irradiated porous nuclear ceramics*. Mechanics of materials, 2006, vol 38, p 608–619.

- [Mordike 76] MORDIKE B.L. *Yield and flow of single crystals of uranium dioxide*. JNM, 1976, vol 60, p 223–226.
- [Moré 78] MORÉ J.J. *The Levenberg-Marquardt Algorithm : Implementation and Theory*. Lecture Notes in Mathematics, 1978, vol 630, p 17–43.
- [Nabarro 48] NABARRO F.R.N. *Deformation of crystals by the motion of single ions*, 1948.
- [Nabarro 67] NABARRO F.R.N. *Theory of crystal dislocations*. Oxford University Press, 1967.
- [Nagtegaal 74] NAGTEGAAL J.C., PARKS D.M. et RICE J.R. *On numerically accurate finite element solutions in the fully plastic range*. Computer methods in applied mechanics and engineering, 1974, vol 2.
- [Noirot 05] NOIROT L. *MARGARET - Description physique et numérique du modèle de gaz applicable à chaque milieu homogène d'un combustible UO_2 ou MOX*. NT CEA/DEN/DEC/SESC/LSC n°2004-040, mai 2005.
- [Noirot 06] NOIROT L. *MARGARET : An Advanced Mechanistic Model of Fission Gas Behavior in Nuclear Fuel*. Journal of Nuclear Science and Technology, 2006, vol 43, p 1149–1160.
- [Nygards 02] NYGARDS M. et GUDMUNDSON P. *Three-dimensional periodic Voronoi grain models and micromechanical FE-simulations of a two-phase steel*. Computational Materials Science, 2002, vol 24.
- [Pacull 09] PACULL J., MICHEL B., CASTELIER E. et DÉBORDES O. *Modèle numérique micromécanique d'agrégat polycristallin pour le comportement des combustibles oxydes*. Neuvième Colloque National en Calcul des Structures. Giens. mai 2009.
- [Pegon 00] PEGON P. *Joint Model*, 2000.
- [Perales 05] PERALES F., MONERIE Y., DUBOIS F. et STAINIER L. *Numerical simulation of dynamical fracture in heterogeneous materials*. Computational Fluid and Solid Mechanics, 2005, p 437–441.
- [Perales 07] PERALES F., BOURGEOIS S., CHRYSOCHOOS A. et MONERIE Y. *Two field multibody method of periodic homogenization in fracture mechanics of non linear heterogeneous materials*. Engineering Fracture Mechanics, 2007.
- [Pilvin 90] PILVIN P. *Approches multiéchelles pour la prévision du comportement anélastique des métaux*. Thèse : Université Paris-Nord VI, 1990.
- [Poirier 73] POIRIER J.P. *Plasticité à haute température des solides cristallins*. Editions Eyrolles, 1973.
- [Raj 71] RAJ R. et ASHBY M. F. *On grain boundary sliding and diffusional creep*. Metallurgical Transactions, 1971, vol 2, p 1113–1127.
- [Rapperport 60] RAPPERPORT E.F et HUNTRESS A.M. *USAEC report*, 1960.
- [Sani 81] SANI R. L., GRESHO P. M., LEE R. L. et GRIFFITH D. F. *The cause and cure of spurious pressures generated by certain FEM solutions of the Navier-Stokes equations - part I*. International journal for numerical methods in fluids, 1981, vol 1, p 17–43.
- [Sauter 01] SAUTER F. *Comportement viscoplastique du dioxyde d'uranium à haute température*. Thèse : Institut National Polytechnique de Lorraine, 2001.
- [Seltzer 72] SELTZER M.S., CLAUER A.H. et WILCOX B.A. *The influence of stoichiometry on compression creep of polycrystalline UO_{2+x}* . JNM, 1972, vol 44, p 331–336.
- [Sladkoff 99] SLADKOFF M., HUET F. et MOCELLIN A. *Recommandation pour la loi de fluage stationnaire de UO_2 non dopé : mise à jour de fin 1998 intégrant les études de fluage sur les lots L209609 et L209619*. NT LACA n°007, octobre 1999.
- [Solomon 73] SOLOMON A. *Irradiation-induced creep of UO_2* . Journal of American Ceramic Society, 1973, vol 56, p 164.
- [Stawiaski 05] STAWIASKI J. *Caractérisation et modélisation 2D/3D du combustible MOX par analyse d'images*. NT CEA/DEN/DEC/SPUA/LMPC n°2005-072, août 2005.

BIBLIOGRAPHIE

- [Vincent 07] VINCENT P.G. *Modélisation micromécanique de la croissance et de la percolation de pores sous pression dans une matrice céramique à haute température*. Thèse : Université de Provence - Aix - Marseille I, Novembre 2007.
- [Vivant-Duguay 98] VIVANT-DUGUAY C. *Contribution à l'étude du fluage du dioxyde d'uranium - Rôle des activateurs de croissance cristalline*. Thèse : INSA Lyon, Novembre 1998.
- [Weertman 57] WEERTMAN J. *Steady-state creep based on dislocation climb*. Journal of Applied Physics, 1957, vol 28, p 362–364.
- [White 04] WHITE R.J. *The development of grain-face porosity in irradiated oxide fuel*. JNM, 2004, vol 325, p 61–77.
- [Wolfe 67] WOLFE R.A. et KAUFMAN S.F. *Mechanical properties of oxide fuels*. LSBR/LWB development program, 1967.
- [Yust 69] YUST C.S. et MCHARGUE J. *Dislocations substructures in deformed uranium dioxide single crystals*. JNM, 1969, vol 31.

Cinquième partie

Annexes

Annexe A

Algorithme de tirage des germes

La procédure de tirage des germes se fait de façon itérative : à chaque nouveau germe tiré avec une densité de probabilité uniforme dans une “boîte” de dimensions fixées, les deux critères géométriques (voir paragraphe 3.2.4.4) sont testés sur le diagramme de Voronoï obtenu à partir des germes précédemment retenus.

L'étape de translation du germe nouvellement tiré pour conserver les propriétés de périodicité est réalisée une fois les deux critères vérifiés.

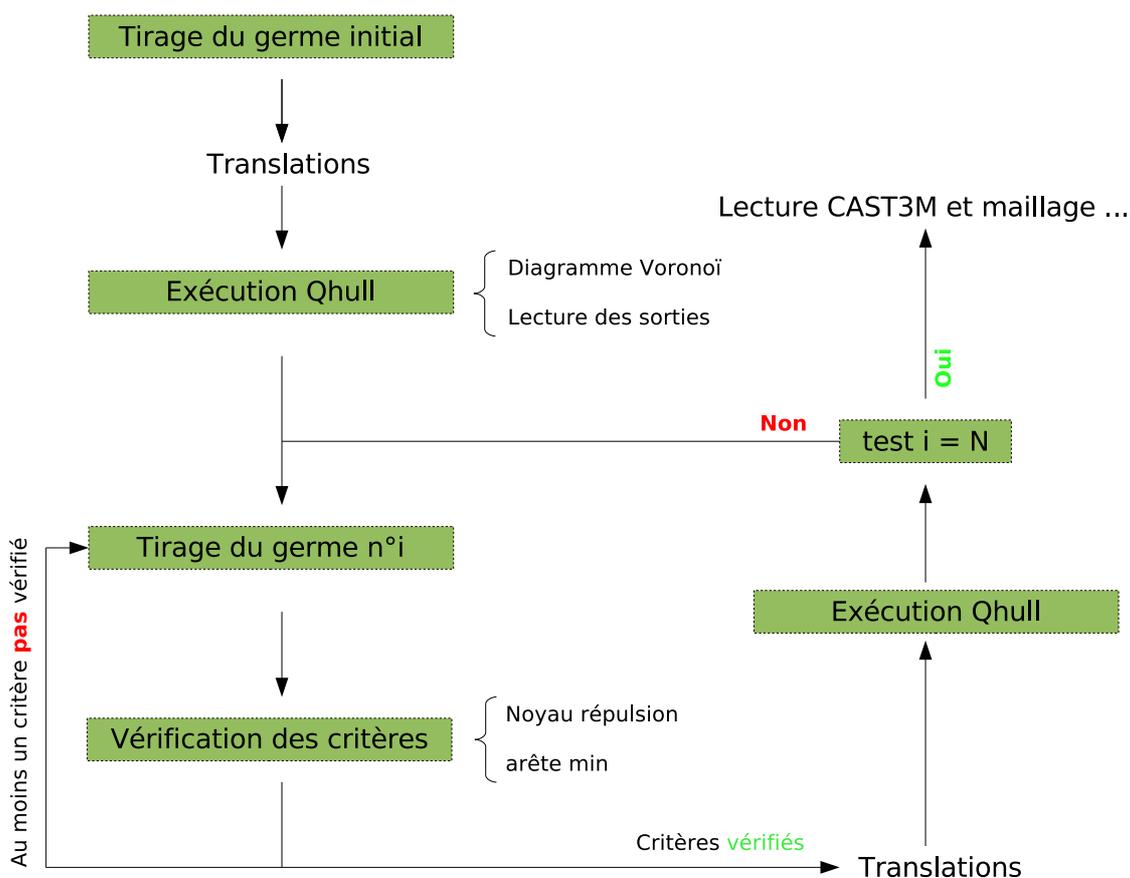


FIGURE A.1 – Algorithme de génération d'un agrégat à N grains

Annexe B

Orientations cristallines

Les grains qui constituent l'agrégat sont des cristaux d' UO_2 chacun caractérisé par son orientation cristallographique. Cette orientation est repérée par les trois angles d'Euler (ϕ_1, Φ, ϕ_2) définis figure B.1 qui permettent le passage du repère local (lié au grain) au repère macroscopique de l'agrégat.

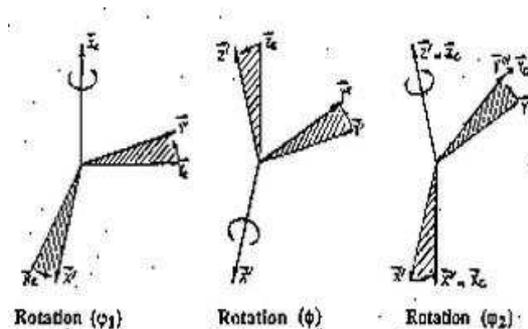


FIGURE B.1 – Définition des angles d'Euler

La matrice de passage reliant repère local et repère global est donc la composée de trois rotations (\mathbf{Oz}, ϕ_1), (\mathbf{Ox}'', Φ), (\mathbf{Oz}', ϕ_2).

Le choix des orientations cristallines joue un rôle prépondérant dans le comportement effectif du VER polycristallin puisque l'anisotropie des différents modèles de comportement intragranulaire¹ est issue directement des propriétés de symétrie du cristal d' UO_2 . La distribution des orientations cristallines peut être réalisée selon différentes stratégies :

- Répartir les orientations avec une densité de probabilité uniforme ;
- Optimiser la distribution des orientations en tenant compte des propriétés de symétrie du cristal de façon à se rapprocher de l'isotropie macroscopique.
- Déterminer une Fonction de Distribution des Orientations Cristallines (FDOC) obtenue par diffraction de rayons X ;

Les deux premières approches ont été mises en oeuvre dans le cadre de cette étude.

1. voir chapitre 4

B.1 Répartition aléatoire

La génération d'une direction aléatoire de probabilité uniforme sur la sphère unité nécessite de choisir les densités de probabilités judicieuses pour les angles d'Euler.

La surface de la sphère unité est donnée par $S = 4\pi r^2 = 4\pi$. Il en découle que la densité de probabilité par unité de surface sur la sphère uniforme pour une distribution uniforme est de $\frac{1}{4\pi}$ avec $\int_S \frac{1}{4\pi} = 1$. Si la position sur la sphère unité est repérée avec les angles (ϕ_1, Φ) alors la densité de probabilité de tomber dans l'intervalle $[\phi_1, \phi_1 + d\phi_1] \times [\Phi, \Phi + d\Phi]$ est donnée par l'équation B.1.

$$p(\phi_1, \Phi) = \frac{1}{4\pi} dS = \frac{1}{4\pi} \sin(\Phi) d\phi_1 d\Phi \quad (\text{B.1})$$

Avec dS l'élément d'intégration en coordonnées sphériques. La probabilité P peut se décomposer sous la forme d'un produit de probabilités indépendantes :

$$p(\phi_1, \Phi) = \left(\frac{1}{2} \sin(\Phi) d\Phi \right) \left(\frac{1}{2\pi} d\phi_1 \right) = P_1(\Phi) P_2(\phi_1) \quad (\text{B.2})$$

- $P_2(\phi_1)$ est une distribution uniforme entre 0 et 2π , de valeur $\frac{1}{2\pi}$;
- Pour générer numériquement une variable aléatoire Φ il est nécessaire de déterminer l'inverse F^{-1} de la fonction de répartition F de $P_1(\Phi)$. C'est cette fonction F^{-1} qui sera appliquée à une distribution aléatoire uniforme u entre 0 et 1 pour obtenir la fonction de répartition de Φ . En effet :

$$F(\Phi) = \int_{-\infty}^{\Phi} P_1(f) df \quad (\text{B.3})$$

$$F(\Phi) = \int_{-\infty}^{\Phi} \frac{1}{2} \sin(f) df \quad (\text{B.4})$$

$$F(\Phi) = \dots \quad (\text{B.5})$$

$$F(\Phi) = \frac{1}{2} (1 - \cos(\Phi)) \quad (\text{B.6})$$

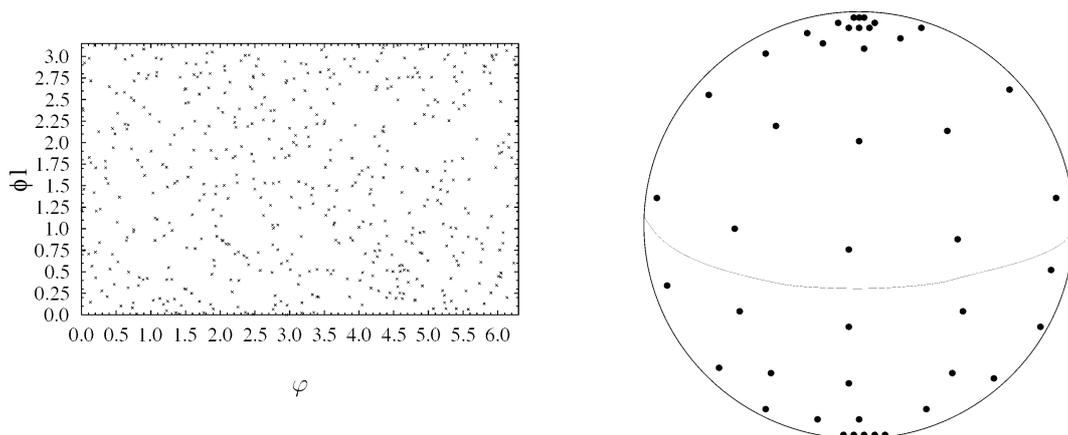
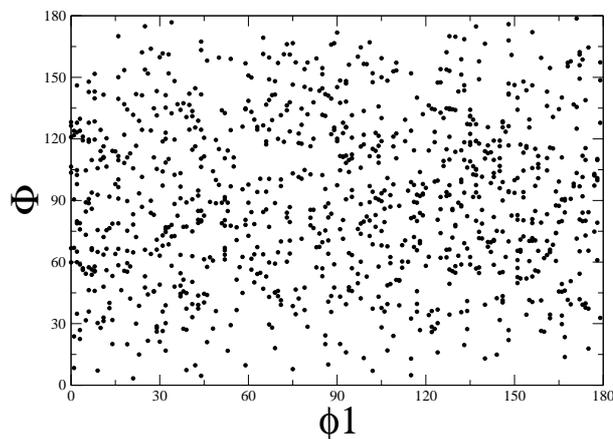
$$(\text{B.7})$$

Ce qui permet d'aboutir à l'équation B.8 :

$$F(\Phi) = F^{-1}(u) = \arccos(1 - 2u) \quad (\text{B.8})$$

La mutation Φ joue un rôle particulier dans le repérage de l'orientation cristallographique et contrairement aux autres angles d'euler sa densité de probabilité n'est pas uniforme. En effet pour un jeu d'angles d'euler distribué uniformément dans l'espace (ϕ_1, Φ) , une projection sphérique montre que les orientations générées sont situées préférentiellement au niveau des pôles, comme illustré figure B.2. Les grains situés dans ces zones auront un comportement mécanique semblable, et les résultats obtenus avec ce type de distribution confirment que la texture représentée est intrinsèquement anisotrope.

Lorsque l'on tient compte de la distribution $F(\Phi) = F^{-1}(u) = \arccos(1 - 2u)$, les résultats obtenus pour la génération de 200 orientations aléatoires projetés dans l'espace (ϕ_1, Φ) et présentés figure B.3 montrent un "dépeuplement" relatif des zones extrêmes $\Phi \rightarrow 0$ et $\Phi \rightarrow 180^\circ$ correspondant aux "pôles" de la projection de Mercator. C'est cette hétérogénéité apparente qui correspond en réalité à une distribution uniforme des orientations cristallines.


 FIGURE B.2 – Répartition des orientations cristallographiques dans l'espace (ϕ_1, Φ)

 FIGURE B.3 – Répartition des orientations cristallographiques dans l'espace (ϕ_1, Φ)

B.2 Orientations équiréparties

Il est possible de générer une texture la plus isotrope donnée pour une taille d'agrégat en sélectionnant des orientations équiréparties en considérant les propriétés de symétrie du cristal considéré :

- L'angle (ϕ_1) prend des valeurs équiréparties sur $[0 ; 360]^\circ$;
- Les valeurs des angles (Φ, ϕ_2) dépendent de la symétrie du cristal considéré. Dans le cas de la symétrie cubique (tel que l' UO_2), le domaine se limite à l'un des 24 triangles standards de la sphère stéréographique (soit $(\Phi, \phi_2) \in [0; 45]^\circ \times [0; 45]^\circ$ [Masson 98]).

La méthode généralement retenue pour générer un jeu d'orientations équiréparties consiste à partager ce triangle standard en cases d'aires égales comme illustré figure B.4. Masson [Masson 98] a proposé un algorithme pour générer des orientations équiréparties dans le cas d'un cristal de symétrie cubique. Un exemple de ces jeux d'orientations est reporté dans le tableau B.1.

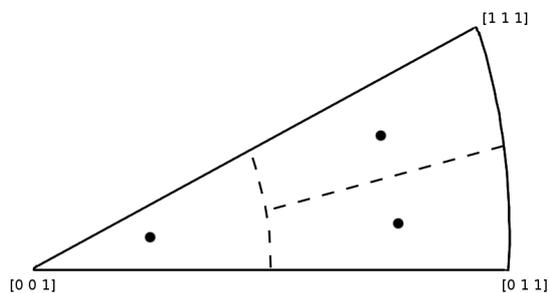


FIGURE B.4 – Partage du triangle standard en zones d'aires égales

$\phi_1 (^\circ)$	$\Phi (^\circ)$	$\phi_2 (^\circ)$	$\phi_1 (^\circ)$	$\Phi (^\circ)$	$\phi_2 (^\circ)$
0	7.15173	22.5	0	34.8109	38.5523
90	7.15173	22.5	90	34.8109	38.5523
180	7.15173	22.5	180	34.8109	38.5523
270	7.15173	22.5	270	34.8109	38.5523
0	18.6988	12.8566	0	39.5409	6.00703
90	18.6988	12.8566	90	39.5409	6.00703
180	18.6988	12.8566	180	39.5409	6.00703
270	18.6988	12.8566	270	39.5409	6.00703
0	22.0279	35.3566	0	40.7755	17.8311
90	22.0279	35.3566	90	40.7755	17.8311
180	22.0279	35.3566	180	40.7755	17.8311
270	22.0279	35.3566	270	40.7755	17.8311
0	28.7978	8.43964	0	43.2312	29.1525
90	28.7978	8.43964	90	43.2312	29.1525
180	28.7978	8.43964	180	43.2312	29.1525
270	28.7978	8.43964	270	43.2312	29.1525
0	30.8591	24.492	0	46.9117	39.8283
90	30.8591	24.492	90	46.9117	39.8283
180	30.8591	24.492	180	46.9117	39.8283
270	30.8591	24.492	270	46.9117	39.8283

TABLE B.1 – 40 orientations équiréparties [Masson 98]

Annexe C

Conditions de périodicité pour le calcul EF

Cette annexe s'attache à décrire la mise en équation des conditions de périodicités pour les différents calculs éléments finis présentés dans ce document.

Dans un premier temps une méthodologie pour l'utilisation de conditions de type contraintes imposées est présentée dans le cadre de l'homogénéisation périodique.

Un deuxième paragraphe décrit plus précisément les différents éléments de périodicité pris en compte dans le cas d'un VER polycristallin de géométrie "irrégulière", pour lequel les frontières du domaine respectent les joints de grains.

C.1 Ecriture des conditions de périodicité dans le cas général

C.1.1 Position du problème

Soient $x^m = (x_1^m, x_2^m, x_3^m)$ et $x^n = (x_1^n, x_2^n, x_3^n)$ deux noeuds reliés par périodicité d'un domaine Ω . Comme nous l'avons vu au paragraphe 4.1.2.1, le décalage respectif de ces noeuds sont liés par la relation (4.2) rappelée ici sous la forme :

$$\Delta \mathbf{U} = \mathbf{u}(\mathbf{x}^m) - \mathbf{u}(\mathbf{x}^n) = \mathbf{E} \cdot (\mathbf{x}^m - \mathbf{x}^n)$$

Soit, en développant :

$$\begin{aligned} \Delta U_1 &= E_{11} \Delta x_1 + E_{12} \Delta x_2 + E_{13} \Delta x_3 \\ \Delta U_2 &= E_{21} \Delta x_1 + E_{22} \Delta x_2 + E_{23} \Delta x_3 \\ \Delta U_3 &= E_{31} \Delta x_1 + E_{32} \Delta x_2 + E_{33} \Delta x_3 \end{aligned}$$

C.1.2 Utilisation de noeuds fictifs

Soient A et B deux noeuds quelconques **n'appartenant pas** à Ω . Par convention, écrivons :

$$\begin{pmatrix} U_1(A) \\ U_2(A) \\ U_3(A) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_{11} \\ E_{22} \\ E_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_1(B) \\ U_2(B) \\ U_3(B) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_{12} \\ E_{13} \\ E_{23} \end{pmatrix}$$

Les relations de périodicité précédentes peuvent alors se réécrire :

$$\begin{aligned} \Delta U_1 &= U_1(A) \Delta x_1 + U_1(B) \Delta x_2 + U_2(B) \Delta x_3 \\ &\dots \end{aligned}$$

Pour imposer une déformation macroscopique au domaine Ω , il suffit bien entendu d'imposer le déplacement correspondant au couple de noeuds (A,B). L'utilisation de noeuds fictifs devient performante pour la mise en oeuvre de conditions aux limites de type contraintes imposées. En effet il suffit dans ce cas d'imposer la force nodale correspondante sur l'un des deux noeuds fictifs pour que la contrainte soit "transmise" à Ω par le jeu des relations de périodicité.

C.2 Elements de périodicité pour la géométrie irrégulière

La géométrie retenue pour le VER polycristallin utilisé pour l'ensemble de cette note a été qualifiée de "irrégulière" : elle est constituée de l'ensemble des grains associés aux germes du tirage initial¹ et par définition ses frontières respectent les joints de grains.

L'étude des propriétés de périodicité de ce type de VER (par exemple dans le cas d'un agrégat 2D périodique à 4 grains, voir figure C.1) permet de mettre en évidence un certain nombre de spécificités dont il faudra tenir compte au moment du calcul.

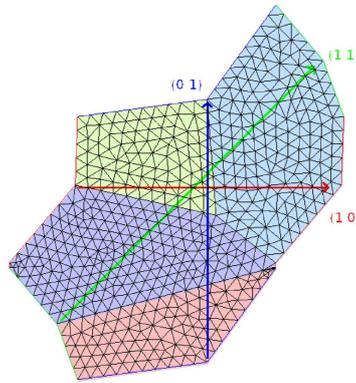


FIGURE C.1 – Agrégat périodique irrégulier à 4 grains

On retrouve en effet pour ce maillage les périodicités classiques repérées par les translations du VER dans les directions horizontale et verticale. Toutefois une partie du contour (identifiée sur la figure C.1 par l'indice (1 1)) ne peut-être retrouvée par périodicité qu'en translatant le maillage dans la direction diagonale. Pour chaque couple de noeuds associée par cette relation de périodicité l'équation (4.2) doit être vérifiée.

En particulier, on remarque immédiatement que quel que soit le tenseur de déformation macroscopique \mathbf{E} considéré, le déplacement relatif $\Delta\mathbf{U}$ observé pour ces noeuds sera non nul. Ces périodicités "coins", qui de fait sont limitées à un unique point dans le cas d'un VER régulier, deviennent ici potentiellement des arêtes qu'il faut traiter de manière spécifique.

Ces éléments de périodicité sont issus de la construction du diagramme de Voronoï périodique : les quatre directions de périodicité possibles correspondent aux huit translations du tirage de germes initial pour générer la périodicité. L'existence de surfaces liées par les différents vecteurs de périodicité dépend en conséquence du tirage de germe effectué : dans l'exemple présenté en figure C.1, seule une des deux directions diagonales met en relation deux parties du contour mais d'autres configurations sont envisageables pour des tirages différents.

1. Par opposition avec ceux générés par translation dans le but d'obtenir la périodicité du diagramme de Voronoï

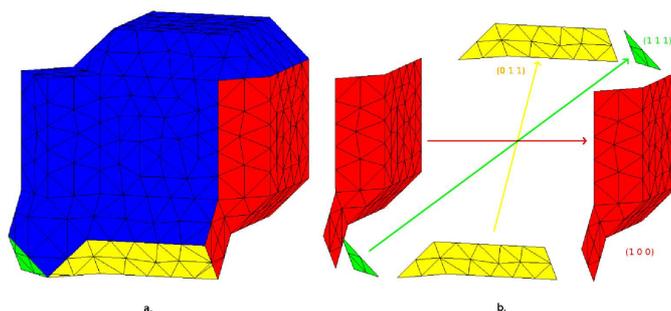


FIGURE C.2 – VER générique(a.) et mise en évidence des différents types de périodicité (b.)

C.2.1 Cas 3D

Dans le cas d'un agrégat tridimensionnel le motif initial des germes doit être translaté 26 fois (pour 26 "cubes" voisins du VER) pour observer la périodicité. Potentiellement, ce sont donc 13 directions de périodicité qu'il est nécessaire de prendre en compte :

- 3 périodicité "faces" usuelles ;
- 6 périodicités "arêtes" ;
- 4 périodicités "coins" .

Ceci est illustré sur un VER générique (voir figure C.2) qui possède les différents types de périodicités : face (en rouge sur la figure), arête (en jaune) et coin (en vert). Une fois repérées les directions de périodicité, l'écriture des conditions aux limites associées au VER est identique à celle présentée dans le cas 2D.

C.3 Comparaison des deux types de géométries du VER

Le VER retenu pour cette étude est un motif périodique de 40 grains maillés par des triangles à 3 noeuds. A cette géométrie est associée un modèle de comportement élastique linéaire isotrope dont les coefficients sont tirés aléatoirement pour chaque grain. Le tirage est choisi aléatoire uniforme tant pour le module d'Young (voir figure C.3) que pour le coefficient de Poisson (voir le tableau C.1 pour les valeurs moyennes \bar{E} , $\bar{\nu}$ et les écarts-types $\langle E \rangle$, $\langle \nu \rangle$ retenus). On génère de la sorte deux modèles équivalents à bords rectilignes (modèle a.) ou non (modèle b.).

Le calcul est mené à déformations imposées en écrivant les conditions de périodicité sur le contour du VER. La sollicitation macroscopique peut s'écrire sous la forme :

$$\mathbf{E}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

\bar{E} (MPa)	$\langle E \rangle$ (MPa)	$\bar{\nu}$	$\langle \nu \rangle$
2.e5	5.e4	0.3	5.e-2

TABLE C.1 – Déformation imposée et distribution des paramètres matériaux

Les résultats obtenus pour les deux géométries offrent un accord tout à fait satisfaisant, comme l'illustre le tracé d'isovaleurs ϵ_{xx} figure C.4. Une étude plus systématique [Pacull 09] a permis de valider ces résultats en les étendant au calcul du comportement effectif de l'agrégat dans le domaine élastique.

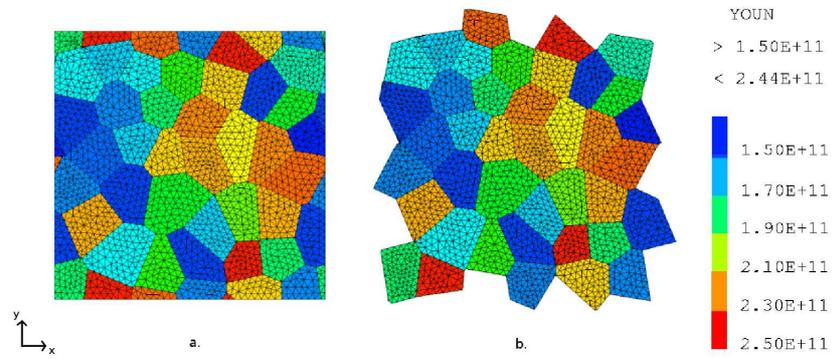


FIGURE C.3 – Répartition des modules d'Young pour le modèle de polycristal élastique

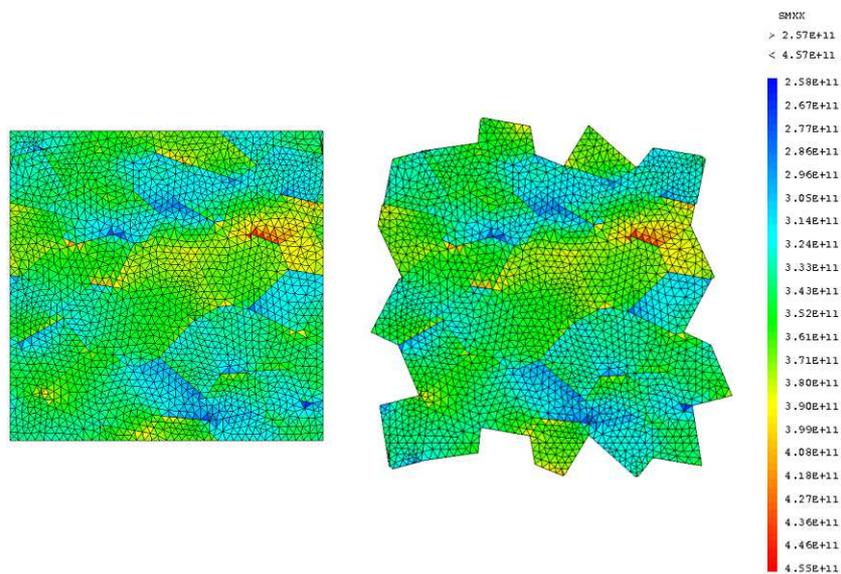


FIGURE C.4 – Contrainte σ_{xx} pour un essai à déformation imposée $\epsilon_{xx} = 1$

Annexe D

Validation de la mise en oeuvre d'éléments cohésifs élastiques

Nous nous proposons ici d'analyser l'impact de la mise en oeuvre de zones cohésives élastiques sur la réponse effective de notre modèle polycristallin.

La simulation d'un essai de Déformation à Vitesse Constante (détaillé paragraphe) est effectuée sur un agrégat de 18 grains maillé avec 1091 éléments par grain. Le modèle de comportement intragranulaire retenu pour cette étude est le modèle ld_2 , décrit au paragraphe 4.3. Les zones cohésives ont un comportement élastique défini par une raideur $K_n = 168.10^{18} Pa.m^{-1}$. Cette valeur est choisie de façon à respecter le critère défini par [Perales 07] pour ne pas modifier la rigidité apparente du VER.

Afin de vérifier que l'introduction d'éléments cohésifs ne modifie pas la réponse effective du polycristal, nous comparons les résultats issus de la simulation à ceux d'un calcul de référence mené sans intégrer de zones cohésives. Nous nous intéressons donc à l'évolution de la contrainte macroscopique Σ_{zz} au cours du temps. Comme le montre la figure D.1, nous pouvons observer le pic de contrainte associé à la multiplication des dislocations déjà décrit au chapitre 4.

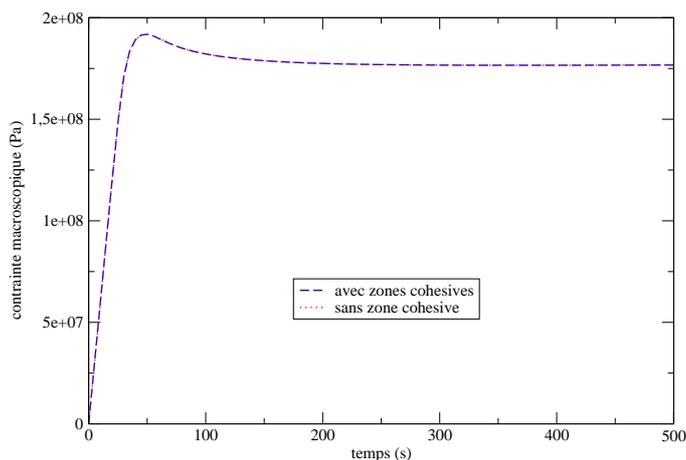


FIGURE D.1 – Evolution temporelle de la contrainte macroscopique

L'écart relatif entre les deux simulations est inférieur à 0.01%, ce qui démontre que l'introduction d'éléments cohésifs élastiques ne modifie pas le comportement effectif du VER dans cette situation.

Afin de poursuivre cette analyse, nous nous intéressons maintenant à la distribution de contraintes normales moyennes aux joints de grains. En l'absence de zones cohésives, ces contraintes étaient approximées par la méthode d'extrapolation du champ de contraintes intragranulaires aux noeuds décrite au paragraphe 7.2.1. L'utilisation de zones cohésives nous donne maintenant accès directement à ces contraintes. De la même manière qu'au chapitre 7, nous allons maintenant comparer les résultats obtenus par ces deux méthodes, cette fois-ci en termes de propriétés statistiques de la distribution

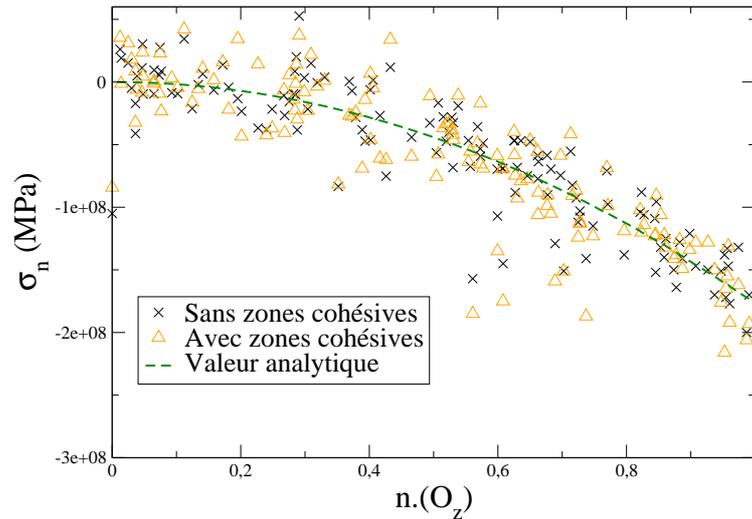


FIGURE D.2 – Comparaison des distributions de contrainte normale issues des calculs avec et sans zones cohésives en fonction de l'orientation du joint de grains

Le maximum de contrainte normale en traction est un premier indicateur, dont le rôle sera important pour l'analyse de phénomènes de décohésion intergranulaire. Dans le cas des résultats obtenus à partir de l'extrapolation du champ de contraintes aux noeuds, cette contrainte vaut 53 MPa , alors que pour le maximum de la distribution de contraintes normales calculées avec les éléments cohésif vaut 42 MPa . Bien que cet écart, de l'ordre de 20%, ne soit pas négligeable, notons que dans les deux cas 22 joints de grains sont en traction.

Table des figures

1.1	Schéma de fonctionnement d'un réacteur REP	22
1.2	Assemblage combustible d'un réacteur à Eau Pressurisée	23
1.3	Dimensions caractéristiques du crayon combustible	24
1.4	La pastille combustible UO_2	25
1.5	Céramographie du combustible	25
1.6	Evolution de la puissance linéique du crayon combustible au cours du temps : régime nominal	26
1.7	Evolution de la puissance linéique du crayon combustible au cours du temps : régime incidentel	26
1.8	Microstructure du combustible restructuré. Les grains initiaux ont été remplacés par des grains submicrométriques et des bulles de gaz de fission se sont formées	28
1.9	Fissuration de la pastille UO_2 après deux cycles REP annuels : réseau de fissures radiales (a.) et axiales (b.)	29
1.10	Représentation schématique de la fissuration et du diabolos	29
1.11	Contact Pastille-Gaine et effet bambou	30
1.12	Concentration de contraintes au niveau du point triple lors de l'IPG	30
2.1	Distributions de contrainte radiale (a.) et tangentielle (b.) dans la pastille au cours d'une montée en rampe de puissance [Colin 03]	35
2.2	Courbe schématique du fluage	36
2.3	Courbes de fluage de l' UO_2 à haute température [Seltzer 72]	36
2.4	Courbes effort-déformation de l' UO_2 à vitesse de compression constante $\dot{\epsilon} = 2.3e - 4 \text{ s}^{-1}$ pour différentes températures [Guérin 85]	37
2.5	Evaluation de la vitesse de fluage avec la densité volumique de fissions [Gatt 05]	38
2.6	Modèles de fluage-diffusion (a.) intergranulaire (Coble) (b.) intragranulaire (Herring)	40
2.7	Modèle de fluage de Ashby et Raj : sollicitation du polycristal (a.), fluage diffusion (b.), accommodation par glissement aux joints de grains (c.)	41
2.8	Modèle de fluage de Ashby et Verrall : La déformation d'ensemble est non nulle mais les grains n'ont pas changé de forme [Ashby 73]	41
2.9	Représentation schématique des dislocations coin (ligne du haut) et vis (ligne du bas) dans un cristal cubique : cristal parfait (a.), création et glissement de la dislocation (b.i), cristal déformé (c.)	43
2.10	Glissement d'une dislocation contrôlé par la montée	43
2.11	Fluage par montée pure de dislocations coins : modèle de [Nabarro 67]	44
2.12	Carte des mécanismes de fluage pour l'oxyde d'uranium [Ashby 82]	46
2.13	Modélisation 1D du crayon combustible	51
2.14	Modélisation 2D (a.) et 3D (b.) du combustible dans ALCYONE [Helfer 06]	52
2.15	Schéma de la microstructure du combustible dans MARGARET [Noirot 06]	53

2.16	Représentation schématique des transferts de gaz entre les différentes localisations possibles du gaz selon MARGARET[Julien 08]	54
2.17	Représentation schématique du couplage entre modèle thermo-mécanique macroscopique et modèle de physico-chimie à l'échelle du grain	55
2.18	Surface d'un évidement en extrémité de pastille, mise en évidence de l'évolution de la surface des grains sous irradiation et de la différence de cette évolution suivant l'orientation cristalline	56
3.1	Principe de l'approche auto-cohérente	62
3.2	Diagramme de Voronoï.	66
3.3	Micrographie d'UO ₂ (a.), image binaire correspondante (b.) [Charollais 97] et coupe 2D d'une mosaïque de Voronoï 3D à 1000 grains (c.)	66
3.4	Distributions expérimentale et théorique de nombre de faces dans le cas de l'UO ₂ [Coster 02].	67
3.5	Morphologie des grains d'UO ₂ : fractographie expérimentale (a.) et mosaïque de Voronoï 3D (b.)	67
3.6	Triangulation de Delaunay - définition.	68
3.7	Triangulation de Delaunay et diagramme de Voronoï.	68
3.8	Mise en oeuvre schématique d'un processus de Poisson : cas de deux sous-domaines Z ₁ et Z ₂ d'un domaine Ω	69
3.9	Maillage réglé (a.) et maillage libre (b.) [Kanit 03].	70
3.10	Différentes étapes de la procédure de maillage	71
3.11	Diagramme de Voronoï sans (a.) ou avec (b.) noyau de répulsion	72
3.12	Mise en évidence des difficultés de maillage	72
3.13	Illustration du critère de taille d'arête minimum	72
3.14	Zone d'influence d'un germe	73
3.15	Construction d'un ensemble de germes périodique [Fritzen 09]	74
3.16	Extraction d'un motif périodique régulier (a) ou irrégulier (b.)	74
3.17	Mise en évidence de la périodicité du maillage de l'agrégat	75
3.18	Numérotation du contour et maillage surfacique	76
3.19	Distributions expérimentale et théorique de nombre de faces dans le cas de l'UO ₂ -résultats obtenus [Coster 02].	76
3.20	Distributions expérimentale et théorique des tailles de grains : cas d'un VER à 1000 grains, avec un noyau de répulsion $r_{min} = 3,2 \mu\text{m}$	77
3.21	Fonction de répartition des tailles de grains : modèle et expérience	77
3.22	Nombre d'éléments du maillage en fonction de la taille de l'agrégat	78
4.1	Structure du dioxyde d'uranium	82
4.2	Ecart à l'isotropie en fonction du nombre de tirages	86
4.3	Ecart moyen à l'isotropie en fonction du nombre de grains	86
4.4	Isovaleurs de σ_{xx} : agrégat (a.) et vue en coupe (b.)	87
4.5	Ecart à l'isotropie en fonction du nombre de grains - orientation équiréparties	88
4.6	Allure expérimentale d'une courbe d'essai d'écrouissage	89
4.7	Représentation d'une dislocation coin dans un cristal d'UO ₂ [Evans 69]	90
4.8	Illustration des différents systèmes de glissement activés dans l'UO ₂ : famille $\langle 110 \rangle \{100\}$ (a.) et $\langle 110 \rangle \{110\}$ (b.)	90
4.9	Cissions critiques initiales en fonction de la température [Alamo 78]	91
4.10	Trace de glissement dans un plan (001) pour un grain d'UO ₂ [Rapperport 60]	91

TABLE DES FIGURES

4.11	Mise en évidence de la présence d'un réseau de dislocations hexagonal au terme d'un essai de compression uniaxiale sur une pastille d'UO ₂ polycristallin.	92
4.12	Repère local associé à une dislocation mixte ρ [Lebensohn 09]	93
4.13	Directions de glissements dans le modèle PC _U : famille $\langle 110 \rangle \{100\}$ (a.) et $\langle 110 \rangle \{110\}$ (b.)	95
4.14	Seuil de plasticité pour différentes orientations	96
4.15	Identification des cissions critiques initiales à partir des données expérimentales . .	96
4.16	Contrainte effective Σ_{zz} au cours du temps : données expérimentales et résultats de la simulation après identification des paramètres	98
4.17	Vitesse de fluage stationnaire en fonction de la contrainte imposée : comparaison entre les loi Gatt-Monerie et PC _U	100
4.18	Coefficient de proportionnalité $\frac{C_d}{d^3}$ pour un agrégat à 200 grains	102
4.19	Fluage stationnaire de l'UO ₂ : comparaison entre la loi ld_2 et la loi Gatt-Monerie à différentes températures	105
4.20	Contrainte Σ_{zz} simulée et expérimentale, et densité de dislocations simulée au cours d'un essai d'érouissage : grandeurs normalisées par leur valeur finale.	105
4.21	Mécanismes de nucléation de cavités : glissement au joint triple(a.), condensation de lacunes (b.) mécanisme de Zener-Stroh (c.), nucléation autour d'un défaut ponctuel (d.) [Kassner 03]	108
4.22	Schéma de la rugosité d'un joint de grain [Dherbey 00]	109
4.23	Mise en évidence de phénomènes de décohésion intergranulaire lors d'un essai de fluage en compression uniaxiale sous 50 MPa à 1465°C [Dherbey 00]	110
4.24	surface de discontinuités	110
4.25	Zone cohésive à l'interface entre deux mailles volumiques [Vincent 07]	111
4.26	Génération d'éléments cohésifs sur l'enveloppe du VER : translation d'un joint de grain et repérage des deux surfaces en vis-à-vis	112
4.27	Loi cohésive normale : contrainte normale en fonction du saut de déplacement dans le cas d'une sollicitation de charge-décharge en traction normale [Vincent 07]. . . .	113
4.28	Critère de Mohr-Coulomb pour le comportement tangentiel des zones cohésives . .	114
4.29	Comportement élasto-plastique parfait en glissement des joints de grains	114
5.1	Maillage de l'agrégat à 100 grains utilisé pour la simulation	121
5.2	Evolution de la contrainte effective Σ_{zz} au cours du temps	122
5.3	Evolution des densités de dislocations moyennes sur l'agrégat des différents systèmes au cours du temps	122
5.4	Isovaleurs de déformation ε_{zz} à la fin du calcul	123
5.5	distribution de pression hydrostatique moyenne par grain $\overline{P_{hyd}}^g$ à la fin de la simulation	124
5.6	Isovaleurs de pression hydrostatique (Pa) à la fin de la simulation, agrégat complet (ligne du haut) et vue tronquée (ligne du bas). a. maillage, b. champ aux points de Gauss, c. champ moyenné par élément, d. champ extrapolé aux noeuds	125
5.7	Distribution de l'écart-type intragranulaire sur la pression hydrostatique $\langle P_{hyd} \rangle^g$ à la fin de la simulation	126
5.8	Distribution de σ_n en fonction de l'orientation du joint de grain	127
5.9	Distribution de σ_t en fonction de l'orientation du joint de grain	127
5.10	distribution de pression hydrostatique moyenne aux joints de grains $\overline{P_{hyd}}^{jdg}$ à la fin de la simulation	128
6.1	Test du poinçon de Prandtl : conditions aux limites	134

6.2	Test du poinçon de Prandtl : maillages utilisés. a. qua(81), b. qua(729), c. tri(81), d. tri(729), e. tri2(81), f. tri2(729)	134
6.3	Test du poinçon de Prandtl : courbe réponse pour les éléments linéaires	135
6.4	Test du poinçon de Prandtl : courbe réponse pour les éléments quadratiques	135
6.5	Résultante en fonction du déplacement imposé : test du Poinçon de Prandtl pour le modèle PC _U , cas de tétraèdres linéaires et quadratiques	135
6.6	Arrangement générique de 4 éléments quadrilatères à 4 noeuds	137
6.7	Triangles Ai associés au mode checkerboard	137
6.8	Visualisation des maillages l_1, l_3, l_5	138
6.9	Erreur relative sur la contrainte effective Σ_{zz} en fonction du raffinement du maillage par rapport au résultat de référence q_3 à différents instants : au pic de contrainte (55 s), lors de l'adoucissement (120 s) et en fin de simulation (1000 s)	139
6.10	Evolution de la densité de dislocation moyenne au cours du temps pour différents maillages linéaires (l_i) et quadratiques (q_i)	140
6.11	Erreur relative sur la densité de dislocation moyenne ρ en fonction du raffinement du maillage par rapport au résultat de référence q_3 à différents instants : au pic de contrainte, lors de l'adoucissement et en fin de simulation	140
6.12	Pression hydrostatique dans un grain à la fin du calcul : champ de contraintes aux points de Gauss (a.), moyenné par élément (b.) et extrapolé aux noeuds (c.). Cas des maillages d'éléments linéaires (l_5) et quadratiques (q_1)	141
6.13	Pression hydrostatique moyenne dans un grain à la fin du calcul en fonction du raffinement du maillage : champ de contraintes aux points de Gauss et extrapolé aux noeuds	142
6.14	Ecart-type sur la pression hydrostatique dans un grain $\langle P_{hyd} \rangle^g$ à la fin du calcul en fonction du raffinement du maillage : champ de contraintes aux points de Gauss, moyenné par élément et extrapolé aux noeuds	143
6.15	Ecart-type sur la contrainte normale aux joints de grains par rapport à la valeur "homogène" à la fin du calcul en fonction du raffinement du maillage pour les éléments linéaires (courbe verte) ou quadratiques (courbe jaune)	144
6.16	Ecart-type sur la contrainte tangentielle aux joints de grains par rapport à la valeur "homogène" à la fin du calcul en fonction du raffinement du maillage pour les éléments linéaires (courbe verte) ou quadratiques (courbe jaune)	144
6.17	Ecart-type sur la pression hydrostatique aux joints de grains à la fin du calcul en fonction du raffinement du maillage	145
7.1	Orientations des joints de grains	151
7.2	Nombre d'éléments par joint de grain en fonction du N° du maillage	151
7.3	Calcul des contraintes interfaciales par réintégration de la loi de comportement : éléments du calcul	154
7.4	Dégénération d'un élément de volume en élément joint [Pegon 00]	155
7.5	Erreur sur la contrainte normale moyenne par joint de grain : comparaison entre la valeur analytique et les résultats de simulation. Distribution de contraintes en fonction de l'orientation du joint, calcul pour $K_n = 1.68e20Pa$	156
7.6	Erreur sur la contrainte normale moyenne par joint de grain : comparaison entre la valeur analytique et les résultats de simulation pour différentes valeurs de raideur élastique. Ecart moyen (courbe verte) et écart maximal (courbe orange).	157
7.7	Evolution de la contrainte normale en fin de simulation pour les différents joints de grains en fonction du raffinement de maillage, cas des éléments linéaires	158

TABLE DES FIGURES

7.8	Evolution de la contrainte normale en fin de simulation pour les joints de grains N ° 1 et 2 en fonction du raffinement de maillage, cas des éléments quadratiques	159
7.9	Evolution de la contrainte normale en fin de simulation pour le joint de grains N ° 3 en fonction du raffinement de maillage, cas des éléments quadratiques	160
7.10	Présentation schématique du problème : détermination du vecteur contrainte sur le contour γ du sous ensemble ω_1 inclus dans Ω	160
7.11	Champ de contrainte normale $\mathbf{F} \cdot \mathbf{n}$ sur un joint de grain de normale $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)$ tel que $n_z^2 \Sigma_{zz} = 4.68 MPa$	162
7.12	Erreur relative entre contrainte normale analytique et contrainte normale calculée en fonction du nombre d'éléments dans les joints de grains	162
8.1	Micrographies de pastilles d'UO ₂ en compression : mécanismes de cavitation ($\sigma = 25$ MPa) (a.) et de fissuration intergranulaire ($\sigma = 50$ MPa) (b.) [Dherbey 02]	168
8.2	Schéma de principe des mesures de décohésion [Dherbey 00]	169
8.3	Déformation axiale effective E_{zz} au cours du temps	170
8.4	Valeur maximale de la contrainte normale moyenne par joint de grain au cours du temps	170
8.5	Allure de la courbe de traction de l'élément cohésif pour différentes valeurs du seuil de décohésion $\sigma_{n_3}^{max} \geq \sigma_{n_2}^{max} \geq \sigma_{n_1}^{max}$	171
8.6	Temps de fin du calcul en fonction de σ_n^{max}	173
8.7	Agrégat (a.) et représentation des zones cohésives entièrement endommagées en fin de simulation (en rouge) sur une vue en coupe (b.). Cas du calcul pour $\sigma_n^{max} = 10 MPa$	173
8.8	Analyse des profils de décohésion et répartition de la contrainte équivalente de Von Mises sur une vue en coupe : déformée (amplification x 20) et σ^{eq} à $t = 200s$ (a., b.) et à $t = 715s$ (c., d.). Cas de la simulation avec un seuil de décohésion $\sigma_n^{max} = 10$ MPa	174
8.9	Initiation de la décohésion au joint triple : détail d'un plan de coupe pour le calcul avec un seuil de décohésion $\sigma_n^{max} = 20 MPa$ (a.) et représentation schématique [Kassner 03] (b.)	175
8.10	Nombre de joints de grains à contrainte nulle en fonction du temps	175
8.11	Ouverture maximale atteinte en fonction du temps	176
8.12	Proportion de la déformation due à la décohésion dans la déformation totale de l'agrégat en fonction de la valeur du seuil de décohésion.	177
9.1	Evolution de la puissance linéique du crayon au cours du temps : chargement complet (à gauche), montée et plateau de rampe (à droite)	180
9.2	Principe de l'étude : association entre un noeud du maillage macroscopique 1D issu d'ALCYONE et le VER polycristallin	181
9.3	Evolution de la pression hydrostatique effective : point central pastille n_1 (noir), points intermédiaires n_2 (vert) et n_3 (orange), et point extérieur pastille n_4 (bleu)	184
9.4	Evolution de la contrainte effective au cours du temps	185
9.5	Evolution de la contrainte équivalente de Von Mises en fonction du temps au point externe pastille n_4 : comparaison entre le calcul ALCYONE et la simulation sur l'agrégat	186
9.6	Evolution l'écart-type sur la distribution de pressions hydrostatiques intragranulaires moyennes $\overline{P_{hyd}}^g$ au cours du temps. Cas des simulations n_1 (courbe noire) et n_2 (courbe verte)	187
9.7	Distribution de pression hydrostatique intragranulaire moyenne : milieu de rampe (à gauche) et fin de simulation (à droite), calcul n_1 au centre de la pastille	188

9.8	Evolution de la moyenne de l'écart-type sur la distribution de pressions hydrostatiques intragranulaires $\overline{P_{hyd}^g}$ au cours du temps. Cas des simulations n_1 (courbe noire) et n_2 (courbe verte)	188
9.9	Isovaleurs de pression hydrostatique intragranulaire au cours de la montée en rampe : cas de la simulation n_1 au centre de la pastille. Agrégat (a.) et vue en coupe (b.) .	189
9.10	Distribution de pression hydrostatique moyenne aux joints de grains au cours de la montée en rampe : cas de la simulation n_1 (noir) et n_2 (vert).	190
9.11	Distribution de contrainte normale moyenne aux joints de grains au cours de la montée en rampe : cas de la simulation n_1 (noir) et n_2 (vert).	191
9.12	Modélisation 3D de la pastille dans ALCYONE : plans de symétrie et de fissuration (en vert) et évidement (en orange).	193
A.1	Algorithme de génération d'un agrégat à N grains	207
B.1	Définition des angles d'Euler	209
B.2	Répartition des orientations cristallographiques dans l'espace (ϕ_1, Φ)	211
B.3	Répartition des orientations cristallographiques dans l'espace (ϕ_1, Φ)	211
B.4	Partage du triangle standard en zones d'aires égales	212
C.1	Agrégat périodique irrégulier à 4 grains	214
C.2	VER générique(a.) et mise en évidence des différents types de périodicité (b.) . . .	215
C.3	Répartition des modules d'Young pour le modèle de polycristal élastique	216
C.4	Contrainte σ_{xx} pour un essai à déformation imposée $\epsilon_{xx} = 1$	216
D.1	Evolution temporelle de la contrainte macroscopique	217
D.2	Comparaison des distributions de contrainte normale issues des calculs avec et sans zones cohésives en fonction de l'orientation du joint de grains	218

Liste des tableaux

1	Principales notations utilisées dans ce mémoire	13
2	Principales notations utilisées dans ce mémoire (2)	14
2.1	Fluage diffusion - principaux modèles	42
2.2	Fluage dislocations - principaux modèles	45
4.1	Constantes élastiques du monocristal de dioxyde d'uranium : mesures expérimentales	83
4.2	Tenseur de déformations macroscopiques des différents essais	84
4.3	Comportement effectif de l'agrégat	87
4.4	Caractéristiques des essais à Déformation à Vitesse Constante	97
4.5	Paramètres du modèle PC_U	100
4.6	Densités de dislocations (données en m^{-2}) en fonction du niveau de déformation : comparaison des résultats obtenus sur le VER polycristallin avec la loi (4.38) [Yust 69]	105
4.7	Paramètres du modèle de fluage ld_2	106
5.1	Paramètres du chargement thermo-mécanique	120
6.1	Ratio degrés de liberté / contraintes d'incompressibilité pour différents types éléments finis arrangés dans une grille régulière [Nagtegaal 74]	133
6.2	Caractéristiques de la sollicitation	137
6.3	Caractéristiques des différents maillages	138
6.4	Récapitulatif de l'étude de sensibilité : erreur relative au résultat de référence q_3 .	147
7.1	Paramètres du chargement thermo-mécanique	151
B.1	40 orientations équiréparties [Masson 98]	212
C.1	Déformation imposée et distribution des paramètres matériaux	215