Identification multiéchelle et réduction par NTFA du comportement élasto viscoplastique polycristallin du dioxyde d'uranium (UO2) en condition d'insertion de réactivité

Julien Labat

▶ **To cite this version:**

Julien Labat. Identification multiéchelle et réduction par NTFA du comportement élasto viscoplastique polycristallin du dioxyde d'uranium (UO2) en condition d'insertion de réactivité. Mécanique des solides [physics.class-ph]. Ecole Centrale Marseille, 2022. Français. NNT : 2022ECDM0010 . tel-04236057

HAL Id: tel-04236057
https://theses.hal.science/tel-04236057

Submitted on 10 Oct 2023

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.

ÉCOLE CENTRALE DE MARSEILLE

École Doctorale 353 - Sciences pour l'Ingénieur :
Mécanique, Physique, Micro et Nanoélectronique

EDF R&D, MMC, Groupe GCC - Laboratoire de Mécanique et d'Acoustique (UMR 7031 Aix Marseille Université, CNRS, Centrale Marseille)

THÈSE DE DOCTORAT

pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'ÉCOLE CENTRALE DE MARSEILLE

Discipline : Sciences pour l'Ingénieur

Spécialité : Mécanique des solides

Identification multiéchelle et réduction par NTFA du comportement élasto viscoplastique polycristallin du dioxyde d'uranium (UO_2) en condition d'insertion de réactivité

Par

LABAT Julien

Directeur de thèse : MICHEL Jean-Claude

Soutenue publiquement le 13 Décembre 2022

devant le jury composé de :

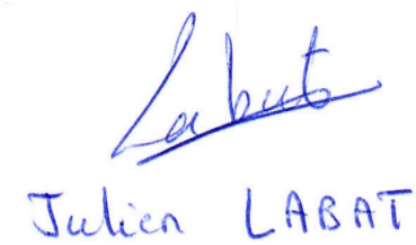
BRENNER Renald	Directeur de recherche CNRS, Institut ∂'Alembert Paris	Rapporteur
MONERIE Yann	Professeur des universités, Université de Montpellier	Rapporteur
NADOT-MARTIN Carole	Professeur des universités, ENSMA Poitiers	Présidente du jury
MICHEL Jean-Claude	Directeur de recherche CNRS, LMA Marseille	Directeur de thèse
LARGENTON Rodrigue	Ingénieur-chercheur expert EDF R&D, CEA de Cadarache	Co-directeur de thèse
MICHEL Bruno	Directeur de recherche CEA, CEA de Cadarache	Co-directeur de thèse
VINCENT Pierre-Guy	Ingénieur-chercheur IRSN, CEA de Cadarache	Invité

Affidavit

Je soussigné, Julien LABAT, déclare par la présente que le travail présenté dans ce manuscrit est mon propre travail, réalisé sous la direction scientifique de Jean-Claude MICHEL, dans le respect des principes d'honnêteté, d'intégrité et de responsabilité inhérents à la mission de recherche. Les travaux de recherche et la rédaction de ce manuscrit ont été réalisés dans le respect à la fois de la charte nationale de déontologie des métiers de la recherche et de la charte d'Aix-Marseille Université relative à la lutte contre le plagiat.

Ce travail n'a pas été précédemment soumis en France ou à l'étranger dans une version identique ou similaire à un organisme examinateur.

Fait à MARSEILLE le 22/09/2022



Cette œuvre est mise à disposition selon les termes de la Licence Creative Commons Attribution - Pas d'Utilisation Commerciale - Pas de Modification 4.0 International.

Résumé

Les études de sûreté nucléaire, réalisées avec des codes industriels de simulation du comportement thermomécanique du crayon combustible, nécessitent des temps de calcul raisonnables afin de simuler tous les scénarios possibles et envisageables au sein d'un Réacteur à Eau Pressurisée (REP). Au-delà du comportement effectif de la pastille combustible, il est parfois intéressant de descendre en échelle pour étudier des phénomènes locaux. Une première approche consisterait à effectuer une résolution Élément Finis au carré (EF^2) où dans un premier maillage défini à l'échelle de la pastille est résolu à chaque point d'intégration un problème thermomécanique sur un Volume Élémentaire Représentatif. Ceci est coûteux en temps de calcul, ce qui n'est pas envisageable au sein des codes industriels. Il est alors envisagé de remplacer la deuxième résolution par une méthode de réduction de modèle, basée sur l'approche Nonuniform Transformation Field Analysis (NTFA). Cette méthode permet l'accès aux grandeurs macroscopiques et aux champs locaux tout en réduisant radicalement les temps de simulation.

Cette étude présente une modélisation micromécanique du comportement du combustible de dioxyde d'uranium (UO_2), céramique polycristalline utilisée dans les REP, pour des sollicitations typiques d'un accident d'insertion de réactivité (RIA). Au-delà d'une certaine température, l'UO_2 a un comportement élasto-viscoplastique avec écrouissage dépendant des conditions de sollicitation en température et vitesse de déformation macroscopique $(T, \dot{\bar{\varepsilon}})$. Dans un premier temps, via l'approche en champ complet, une identification inverse de la loi d'évolution locale monocristalline est réalisée à partir de données expérimentales obtenues à l'échelle locale puis macroscopique. Dans un deuxième temps, le modèle NTFA TSO (Tangent Second Order) est développé et appliqué au problème en question. Deux décompositions de la variable d'écrouissage sont étudiées. Ensuite, un travail est effectué pour intégrer les conditions de sollicitations, à savoir températures et vitesses de déformation spécifiques au RIA, dans le modèle NTFA. Enfin, les résultats issus de l'expérimental, du modèle en champ complet et du modèle NTFA TSO sont confrontés aux échelles macroscopique et locale pour des chargements uniaxés, triaxés et quelconques.

Mots clés : élasto-viscoplasticité, réduction de modèle NTFA, polycristal, micromécanique, identification inverse, dioxyde d'uranium UO_2

Abstract

Industrial codes designed for the simulation of the thermomechanical behaviour of the fuel rod are used for nuclear safety studies. It requires reasonable computational times in order to simulate all scenarios within a Pressurized Water Reactor (PWR). Beyond the macroscopic behaviour of the fuel pellet, it is sometimes interesting to go down in scale to study local phenomena. A first approach would be to perform a Finite Element Method squared to two (FEM^2) resolution. It consists to solve a thermomechanical problem on a first mesh defined at the pellet scale where at each integration point is solved another thermomechanical problem on a Representative Elementary Volume. This is time consuming, which is not conceivable within industrial codes. It is then studied to replace the second resolution by a model reduction method based on the Nonuniform Transformation Field Analysis (NTFA) approach. This method allows access to macroscopic quantities and local fields while drastically reducing the computational time.

This study presents a micromechanical modelling of the behaviour of uranium dioxide fuel (UO_2), a polycrystalline ceramic used in PWRs, for loading condition typical of a reactivity initiated accident (RIA). Above a specific temperature, UO_2 has an elasto-viscoplastic behaviour with strain hardening depending on the temperature and macroscopic strain rate $(T, \dot{\bar{\varepsilon}})$. In a first step, via a full-field approach, an inverse identification of the local single crystal evolution law is performed based on experimental data obtained at the local and then at the macroscopic scales. In a second step, the NTFA TSO (Tangent Second Order) model is developed and applied to the problem at hand. Two decompositions of the strain hardening variable are studied. Then, work is done to integrate the specific loading conditions, i.e. temperatures and strain rates of the RIA, into the NTFA model. Finally, the results from the experimental, full-field and NTFA TSO models are compared at the macroscopic and local scales for uniaxial, triaxial and arbitrary loading.

Keywords: elasto-viscoplasticity, model reduction NTFA, polycrystal, micromechanics, inverse identification, dioxide of uranium UO_2

Liste de publications et participation aux conférences

Liste des publications réalisées dans le cadre du projet de thèse :

1. Proceeding au sein d'une conférence soumis à comité de lecture : Congrès Français de Mécanique, Nantes, FRANCE 2022.
2. **Labat J., Largenton R. et Michel J.-C.** « Multiscale identification and NTFA reduction of the elasto-viscoplastic polycrystalline behaviour of uranium dioxide (UO_2) for wide range of loading conditions ». *Journal of Nuclear Materials* (2023), pages 154471. ISSN : 0022-3115. DOI : 10.1016/j.jnucmat.2023.154471.

Participation aux conférences au cours de la période de thèse :

1. Congrès : European Solid Mechanics Conference, Galway, IRLANDE 2022, session : 1-6 - Multiscale Modelling of Polycrystalline Materials.
2. Congrès : Congrès Français de Mécanique, Nantes, FRANCE 2022, session : S12 - Matériaux numériques.

Remerciements

Je remercie avant tout EDF pour le financement de ces travaux. J'en profite pour faire un clin d'oeil à l'équipe combustible et en particulier à Anthony qui a su, à force de persévérance, me trainer jusqu'au café.

Je remercie les membres du jury qui ont su trouver, dans leurs plannings chargés, le temps d'évaluer ce travail de trois années. Je remercie nommément la présidente que je n'ai pas ménagée pour la date. Ils m'ont laissé un très bon souvenir de cette soutenance.

Je remercie les professeurs qui ont croisé mon chemin. La liste est relativement longue. Des premiers cours aux derniers, chacun a eu sa part d'importance. Importance dont je me suis rendu compte une fois les études terminées. Pour n'en citer que quelques-uns à la volée : M. Pignon, Mme Debats, M. Thouron, M. Begue, M. Sawyer, M. Rans, M. Hochard, M. Desoyer, M. Lahellec, Mme. Sarrouy. Un petit clin d'oeil à deux professeurs outre atlantique, M. Begon et M. Leveque ! Bien sûr, une attention particulière à trois d'entre eux qui m'ont suivi, conseillé et encouragé : M. Bourgeois, M. Lejeunes, M. Rossi.

Je remercie les amis doctorants. Je pense qu'il n'est pas absolument nécessaire de rappeler le contexte de ces rencontres et échanges ! En particulier je remercie Patryck, Youssera, Loic, Daria, Sebastien, Camillo, Aldo, Sophie, Jeremie, Isabelle, Felix, Arianne, Benjamin, Gauthier, Romain et bien d'autres qui j'espère ne se vexeront pas !

Je remercie les amis qui m'ont soutenu en écoutant mes problèmes sans probablement y comprendre grand-chose. Je fais un gros clin d'oeil aux amis du Gers Thomas, Charlène, Thibault, Kevin ! La liste est un peu trop longue, je me contenterai de n'en citer que quelques-uns, des jeunes et des moins jeunes : Gus et Valérie, Kemar et Marine, Theo qui a su me changer les idées en me martyrisant en sport et Clem, NDF pour les punitions régulièrement infligées au squash, Majo et Charline pour leur passion pour les jeux, Cata, Brieg, grand Ben, Lolo, Vianney et Appo, Xavier, Chris, Bez, Marine et Pb, Flo, Pasquet et Laura, Bele et Thais, Philou et Sophia, Ju et Léa, Cyssou et Rach, Niko et Ju, HF et Fortane, Guy et Marine, Membrat et Marie, Micka et Cha, Marco et Marion, Benji, Gwen et Marion, et enfin Mailys, Marion et Martin. Pour la pléiade de jeunes qui reste, j'ai malheureusement la flemme de vous énumérer. Portez-vous bien ! Hâte de vous croiser !

Même si cela me parait bizarre, il est quand même difficile de ne pas remercier la famille ! Je remercie mon père, ma mère ainsi que ma soeur et Louis. Une mention particulière pour les trois inspirations du moment que sont Alfred, Hector et Diego !

Un grand merci à ceux qui ont participé à la soutenance et au pot de thèse ! En particulier, je remercie M. Pontier ainsi que son équipe pour l'accueil et le boulot fait en cuisine/service, la direction de l'ECM ainsi que M. Sauval.

Enfin, je remercie mes trois encadrants que sont Bruno, Rodrigue et Jean-Claude. Un clin d'oeil à M. Sercombe et M. Helfer qui m'ont également suivi de loin et avec qui j'ai pu m'entretenir.

Une mention particulière à Jean-Claude pour qui je fus le dernier étudiant. C'est lui qui m'a initialement présenté ce sujet de thèse. Il m'a fait confiance, m'a accompagné de sa bienveillance et de ses connaissances tout le long de ces trois années. J'ai pris un énorme plaisir à travailler avec toi ! J'en tire un enseignement qui je l'espère perdurera.

Une mention particulière à Rodrigue qui m'a également fait confiance, m'a accompagné tant bien que mal, m'a fait profiter de son expertise et connaissances !

Aussi bien l'un que l'autre, vous m'avez aidé ou du moins donné ce supplément d'âme lors des moments chauds, qu'ils soient techniques ou administratifs !

Table des matières

Affidavit . . . . . **I**
Résumé . . . . . **II**
Abstract . . . . . **III**
Liste de publications et participation aux conférences . . . . . **IV**
Remerciements . . . . . **V**

Introduction et démarche employée **1**

I Contexte et étude bibliographique 3

I. Contexte et problématique industrielle - Le comportement mécanique de l'UO_2 en condition accidentelle de type RIA **4**

I.1. Du réacteur à eau pressurisée à la pastille combustible 4

I.1.1. Du réacteur à eau pressurisée à la cuve du circuit primaire 5
I.1.2. De la cuve du circuit primaire à l'assemblage 5
I.1.3. De l'assemblage au crayon combustible 5
I.1.4. La pastille combustible UO_2 6

I.2. Phénomènes et état de la pastille UO_2 en fonctionnement normal 7

I.2.1. Description succincte du comportement thermique de la pastille UO_2 au sein d'un crayon REP irradié en fonctionnement normal 7
I.2.2. Description succincte du comportement mécanique de la pastille UO_2 au sein d'un crayon REP irradié en fonctionnement normal 8

I.3. Comportement du combustible UO_2 en condition accidentelle de type RIA 11

I.3.1. L'accident de type RIA aux différentes échelles du réacteur 11

I.3.2. Transitoires RIA intégraux (structure crayon combustible UO_2) réalisés dans le réacteur CABRI et non rompus - REP Na 2-3-4-5-11 13
I.3.2.1 Observations et commentaires des essais intégraux non rompus . . 13
I.3.2.2 Simulation de l'essai REP-Na 5 lors de l'essai RIA avec le code SCANAIR 17

I.4. Synthèse Chapitre I 21

II. Bibliographie des essais mécaniques macroscopiques et microscopiques, hors irradiation, réalisés sur le combustible (pastille ou monocristaux) de dioxyde d'uranium, de quelques lois de comportement phénoménologiques et des approches en champ complet développées (approche polycristalline) pour modéliser ces essais ainsi que du modèle d'ordre réduit NTFA 22

II.1. Essais expérimentaux macroscopiques et loi phénoménologique « L3F » 22

II.1.1. Mécanismes : Visco-plasticité - Rupture. 23

II.1.1.1 Visco-plasticité induite par la diffusion de lacunes 24

II.1.1.1.1 Viscoplasticité induite par la diffusion de lacunes via la structure cristallographique 24

II.1.1.1.2 Viscoplasticité induite par la diffusion de lacunes via les joints de grains 24

II.1.1.2 Visco-plasticité induite par le glissement de dislocations 25

II.1.1.3 Couplage entre ces deux mécanismes 25

II.1.1.4 Visco-plasticité induite par le glissement des joints de grains 25

II.1.1.5 Rupture élasto-fragile 26

II.1.1.6 Rupture ductile 26

II.1.2. Essais à l'échelle macroscopique sur combustible vierge, hors RIA. 27

II.1.2.1 Essais de compression uniaxée à l'échelle macroscopique 27

II.1.2.1.1 Références analysées 27

II.1.2.1.2 Synthèse du comportement du combustible UO_2 en compression 28

II.1.2.2 Essais de flexion à l'échelle macroscopique 29

II.1.2.2.1 Références analysées 29

II.1.2.2.2 Synthèse du comportement en flexion 31

II.1.3. Essais macroscopiques sur combustible vierge - Condition accidentelle d'insertion de réactivité (RIA) 33

II.1.3.1 Introduction 33

II.1.3.2 Caractéristiques des différents lots et résultats après essais [**Salvo 2014**] 33

II.1.3.2.1 Lot de référence dit de faible densité 33

II.1.3.2.2 Lot de forte densité 34

II.1.3.3 Courbes expérimentales obtenues [**Salvo 2014**] 34

II.1.3.4 Confrontation des résultats [**Salvo 2014**] avec la littérature 41

II.1.3.5 Synthèse du comportement du dioxyde d'uranium avec des conditions expérimentales se rapprochant de l'accident RIA [**Salvo 2014**] 43

II.1.4. Loi phénoménologique « L3F » issue de [**Salvo 2014**] 44

II.1.4.1 La loi phénoménologique « L3F » et ses différentes « composantes » 44

II.1.4.2 Application au code de calcul numérique ALCYONE [**Sercombe 2017**] 50

II.1.4.3 Synthèse de la loi phénoménologique « L3F » [**Salvo 2014**] et de son application dans ALCYONE [**Sercombe 2017**] 52

II.2. Essais expérimentaux sur monocristaux d'UO_2 et une approche à champ complet développée . . . 53
II.2.1. Essais expérimentaux à l'échelle du monocristal . . . 53
II.2.1.1 Références analysées . . . 53
II.2.1.2 Synthèse du comportement monocristallin en compression . . . 54
II.2.2. Approche micromécanique en champ complet type FEM issue des travaux de thèse de [**Pacull 2011 ; Soulacroix 2014 ; Portelette 2018**] . . . 56
II.2.2.1 Aspect monocristallin et calibration de la loi monocristalline . . . 57
II.2.2.2 Aspect polycristallin et calibration de la loi polycristalline . . . 63
II.2.2.3 Synthèse de l'approche micro mécanique à champ complet issue des travaux de [**Portelette 2018**] . . . 66
II.3. Une seconde approche à mettre en parallèle de l'approche micromécanique et introduction de la méthode de réduction de modèle NTFA . . . 68
II.3.1. Mise en parallèle du formalisme proposé dans les travaux de [**Knezevic et al. 2013**] . . . 68
II.3.2. Introduction du modèle d'ordre réduit NTFA . . . 69

II Approche en champ complet : Modélisation et validation (FEM et FFT vs Expérience) du comportement mono et polycristallin de l'UO_2 en condition accidentelle RIA. 74

III. Modélisation et validation (FEM vs Expérience) du comportement monocristallin de l'UO_2 en condition accidentelle RIA. . . . 75
III.1. Contexte expérimental et contexte de simulation . . . 75
III.1.1. Contexte expérimental . . . 75
III.1.1.1 Caractéristiques des essais expérimentaux : [**Sawbridge et Sykes 1971**] . . . 77
III.1.1.2 Caractéristiques des essais expérimentaux : [**Byron 1968a ; Mordike 1976**] . . . 77
III.1.2. Rappel du problème d'intérêt et du formalisme des lois utilisées . . . 77
III.1.3. Présentation de la simulation . . . 80
III.1.4. Convergence au maillage . . . 81
III.2. Données expérimentales . . . 82
III.2.1. Données expérimentales de la famille {100} . . . 83
III.2.2. Données expérimentales de la famille {110} . . . 84
III.2.3. Données de [**Sawbridge et Sykes 1971**] . . . 84
III.2.4. Données de [**Byron 1968a ; Mordike 1976**] . . . 85
III.3. Cadre et calibration d'un cas d'étude : Cas-3 . . . 87
III.3.1. Cadre retenu pour la calibration par la méthode des moindres carrées des coefficients de la loi monocristalline . . . 88
III.3.2. Application au cas d'étude : Cas-3 . . . 89

III.4. Résultats de la calibration des lois monocristallines [Cas-3] vis-à-vis des essais expérimentaux de [**Byron 1968a**], [**Mordike 1976**] et [**Sawbridge et Sykes 1971**] 90
III.4.1. [Cas − 3] vis-à-vis des essais expérimentaux de [**Byron 1968a ; Mordike 1976**] 91
III.4.2. [Cas − 3] vis-à-vis des essais expérimentaux de [**Sawbridge et Sykes 1971**] 92
III.5. Synthèse du chapitre III 93

IV. Modélisation et validation (FFT vs Expérience) du comportement polycristallin de l'UO_2 en condition accidentelle RIA. 94

IV.1. Contexte expérimental et contexte de simulation 94
IV.1.1. Contexte expérimental de [**Salvo 2014**] 94
IV.1.2. Contexte de simulation. 95
IV.2. Résultats et discussion de la calibration monocristalline appliquée aux polycristaux : [Cas-3] vis-à-vis des essais expérimentaux de [**Salvo 2014**]. 99
IV.2.1. [Cas-3] vis-à-vis du lot forte densité (HD) [**Salvo 2014**]. 100
IV.2.2. [Cas-3] vis-à-vis du lot faible densité (REF FD) [**Salvo 2014**]. 101
IV.2.3. Discussion vis-à-vis des résultats obtenus et stratégie de travail envisagée . 102
IV.3. Identification inverse de la loi locale sur les essais expérimentaux polycristallin de [**Salvo 2014**] lot faible densité et [**Ben Saada 2017**] 105
IV.3.1. Identification du coefficient $\tau_i^0(T, \dot{\bar{\varepsilon}})$ 106
IV.3.2. Identification du coefficient $h_i(T, \dot{\bar{\varepsilon}})$ 108
IV.3.3. Comparaison des résultats obtenus par simulation numérique en champ complet FFT avec la loi calibrée vis-à-vis des résultats expérimentaux de [**Salvo 2014**](REF FD) et [**Ben Saada 2017**] 109
IV.4. Formalisme retenu - Synthèse 111
IV.4.1. Formalisme retenu. 111
IV.4.2. Synthèse du chapitre IV 112

III Application de la méthode de réduction de modèle Nonuniform Transformation Field Analysis (NTFA) au comportement polycristallin de l'UO_2 en condition accidentelle de type RIA. Comparaison de l'approche en champ complet (FFT), prise comme référence, avec le modèle d'ordre réduit NTFA et les données expérimentales disponibles 114

V. Application de la méthode d'ordre réduit NTFA à un comportement élasto viscoplastique écrouissable avec développement à l'ordre deux 116

V.1. Cadre des Matériaux Standard Généralisés (MSG), cadre et formalisme du problème considéré. 116
V.1.1. Cadre des Matériaux Standard Généralisés (MSG) et résultats théoriques associés 116
V.1.2. Cadre et formalisme du problème considéré 118

V.2. Application de la NTFA au problème considéré 121
V.2.1. Étape 1 : Décompositions envisagées 121
V.2.2. Étape 2 : Définition et calcul des tenseurs de localisation et d'influence . . . 122
V.2.3. Étape 3 : Approximation des potentiels de force homogénéisés permettant d'établir les lois d'évolution des nouvelles variables réduites 124
V.2.4. Étape 4 : Implémentation numérique 128

VI. Construction des modes. Comparaison d'essais uniaxés entre champ complet (FFT), résultats expérimentaux et modèle d'ordre réduit NTFA TSO. Comparaison des résultats sur des essais triaxés puis quelconques entre champ complet FFT et modèle d'ordre réduit NTFA TSO. 133

VI.1. Construction des modes pour des essais de compression uniaxés 133
VI.1.1. Relève des instantanés 134
VI.1.2. Construction des modes 135
VI.2. Comparaison sur quelques essais de compression uniaxés des différents modèles vis-à-vis d'essais expérimentaux 137
VI.2.1. Réponses effectives 137
VI.2.2. Réponses locales 138
VI.3. Comparaison sur quelques essais triaxés des modèles FFT et NTFA TSO 139
VI.3.1. Construction de la base de modes pour un chargement triaxé 139
VI.3.2. Réponses effectives 140
VI.3.3. Réponses locales 141
VI.4. Comparaison sur quelques essais de sollicitation avec un chargement quelconque des modèles FFT et NTFA TSO. 143
VI.4.1. Construction de la base de modes pour un chargement quelconque 143
VI.4.2. Réponses effectives 143
VI.4.3. Réponses locales 145

VII. Prise en compte des conditions de chargement dans le modèle d'ordre réduit 148

VII.1. Prise en compte de la température. 148
VII.2. Prise en compte de la vitesse de déformation macroscopique. 151
VII.3. Comparaison entre le modèle en champ complet et le modèle d'ordre réduit avec prise en compte des conditions de sollicitation que sont la température et la vitesse de déformation macroscopique 153
VII.3.1. Comparaison sur quelques essais de compressions uniaxés du modèle en champ complet FFT et du modèle d'ordre réduit NTFA TSO 153
VII.3.1.1 Réponses effectives 153
VII.3.1.2 Réponses locales 155
VII.3.2. Comparaison sur quelques essais de compression triaxés du modèle en champ complet FFT et du modèle d'ordre réduit NTFA TSO 155
VII.3.2.1 Réponses effectives 156
VII.3.2.2 Réponses locales 157

Conclusion 159
Perspectives 161

VIII. Bibliographie 163

Annexes 173

A. Partie I Chapitre I - Compléments des simulations des essais REP-Na : simulations des essais REP-Na 2-3-4 en condition accidentelle de type RIA avec le code de simulation numérique SCANAIR 173

A.1. Simulation de l'essai REP-Na 2 173
A.2. Simulation de l'essai REP-Na 3 175
A.3. Simulation de l'essai REP-Na 4 176

B. Partie I Chapitre II - Compléments sur les essais macroscopiques dont la vitesse de déformation se rapproche des conditions accidentelles d'insertion de réactivité [Salvo 2014] 178

B.1. Pente d'écrouissage apparent en fonction de la vitesse de déformation, de la température et de la densité 178
B.2. Contrainte « d'entrée » en plasticité en fonction de la vitesse de déformation, de la température et de la densité 179

C. Partie II Chapitre III - Étude sur le type d'élément utilisé au sein des simulations FEM monocristallines - Problème d'incompressibilité. Comparaisons des réponses CAST3M et ABAQUS 180

C.1. Introduction - Comparaison CAST3M - ABAQUS : Problème d'incompressibilité . 180
C.2. Rappel du problème d'intérêt 180
C.3. Étude de la réponse effective 182
C.4. Étude de la réponse « locale » 185
C.5. Conclusions 186

D. Partie II Chapitre III - Formalismes des lois monocristallines utilisées - Cadre des Matériaux Standards Généralisés 187

D.1. Formalisme Cosinus Hyperbolique 188
D.2. Formalisme Double Décrochement 189
D.3. Conclusions 190

E. Partie II Chapitre IV - Étude de la convergence au maillage 191

E.1. Phase I : Étude sur le nombre de Voxels par Grain. 192

E.1.1. Contrainte moyenne et moment d'ordre 2. 192
E.1.2. Histogrammes de fréquence des contraintes 193
E.1.3. Histogrammes de fréquence d'une certaine norme des contraintes 194

E.2. Phase II : Étude sur le nombre de Grains par VER et sur le tirage aléatoire. 196

E.2.1. Contrainte moyenne et moment d'ordre 2. 196
E.2.2. Histogrammes de fréquence des contraintes 198
E.2.3. Histogrammes de fréquence d'une certaine norme des contraintes 200

F. Partie III Chapitre VI - Complément sur l'implémentation numérique du modèle NTFA TSO 202

F.1. Complément sur les différentes expressions intervenant dans l'implémentation numérique du modèle NTFA. 202

F.2. Valeurs et données numériques intervenant dans l'implémentation numérique. . . . 204

G. Partie III Chapitre V - Loi locale monocristalline : cadre des matériaux standard généralisés 206

G.1. Formalisme Cosinus Hyperbolique 206

Introduction et démarche employée

Le travail consiste à modéliser le comportement polycristallin du combustible UO_2 lors d'un accident d'insertion de réactivité. Cet accident, pouvant se produire au sein d'un réacteur à eau pressurisée, se caractérise par une rupture du mécanisme de commande d'une grappe de contrôle. Cette rupture conduit à l'éjection de cette grappe sous l'effet de la pression du caloporteur*. Cette éjection génère un pulse de puissance relativement important et localisé dans cette zone du cœur du réacteur. Au cours de cet accident, l'énergie déposée au sein du combustible UO_2 induit des sollicitations thermomécaniques très exigeantes avec des températures $T \in [1000, 2600]\,[°C]$ et des vitesses de déformation $\dot{\bar{\varepsilon}} \in [10^{-4}, 10^{1}]\,[s]^{-1}$.

Il est envisagé, dans cette thèse, de développer une loi de comportement micromécanique basée sur la méthode NTFA (Non uniform Transformation Field Analysis [**Michel et Suquet 2016b ; Michel et Suquet 2017**]). La loi permettrait, tout en comportant un nombre restreint de variables internes, de rendre compte d'une part du comportement effectif du polycristal et d'autre part des champs locaux (contraintes et déformations) au sein du polycristal. Par rapport aux approches en champ complet, par exemples Finite Element Method (FEM) ou Fast Fourrier Transformation (FFT), la loi de comportement NTFA polycristalline, tout en fournissant des informations similaires au niveau du comportement effectif et des champs locaux, est plus rapide en temps de calcul [**Michel et Suquet 2016b ; Michel et Suquet 2017**]†. Cette loi peut donc être intégrée et utilisée dans des codes industriels de simulation du comportement thermomécanique du crayon combustible UO_2 pour les études de sureté.

Pour construire cette loi NTFA [**Michel et Suquet 2016b ; Michel et Suquet 2017**], il est nécessaire de développer un modèle en champ complet capable de rendre compte des essais expérimentaux à l'échelle polycristalline tout en fournissant des données pertinentes à l'échelle locale.

Afin de répondre à cette problématique, le travail est subdivisé en trois parties.

Dans la première partie, le contexte industriel est posé chapitre I et la bibliographie abordée est présentée succinctement chapitre II. Plus précisément, dans le chapitre I la problématique industrielle est détaillée et le comportement mécanique du dioxyde d'uranium en condition accidentelle d'insertion de réactivité est précisé. Dans le chapitre II, une bibliographie sur le comportement de l'UO_2 est faite. Celle-ci aborde les phénomènes observés expérimentalement à l'échelle locale (monocristaux) et macroscopique (pastille ou polycristaux). Quelques lois de comportement phénoménologiques et approches en champ complet sont détaillées. En particulier, l'étude expérimentale de [**Salvo 2014**], les études numériques de [**Portelette 2018**] ainsi que de [**Knezevic et al. 2013**] sont abordées. Enfin, une présentation du modèle d'ordre réduit NTFA est faite.

Dans la deuxième partie, les approches en champs complets (FEM et FFT) développées pour simuler les comportements monocristallin et polycristallin du dioxyde d'uranium sont présentés. Plus précisément, le chapitre III s'attache à utiliser une loi locale viscoplastique reprise des travaux de [**Portelette 2018**], prenant en compte la structure cristallographique fluorite de l'UO_2. Cette loi modélise empiriquement le mécanisme thermomécaniquement activé de franchissement de la barrière de Peierls [**Peierls 1940**] des lignes de dislocations. Ici, elle est calibrée (FEM) sur des essais menés à

∗. Pression de $155\,[bar]$ à l'intérieur du cœur (circuit primaire principal) et pression atmosphérique à l'extérieur.

†. Exemple sur processor Intel Xeon X5687 3.6 $[GHz]$ et pour un comportement élasto viscoplastique avec écrouissage cinématique non linéaire : $FFT = 189800\,[s]$ VS $NTFA = 15.96\,[s]$ soit un ratio CPU de 11892.

l'échelle des monocristaux en se basant sur les études expérimentales de [**Byron 1968a ; Sawbridge et Sykes 1971 ; Mordike 1976**]. Dans le chapitre suivant, chapitre IV, par remontage d'échelle et en faisant l'hypothèse que la déformation viscoplastique est induite par ce seul mécanisme à l'intérieur et aux bords des grains, cette loi est appelée dans chacun des grains d'un VER (Volume Élémentaire Réprésentatif) polycristallin. Du fait d'un écart important entre les simulations numériques (FFT) réalisées et les résultats expérimentaux à cette échelle de [**Salvo 2014 ; Ben Saada 2017**], l'approche et la loi sont modifiées, simplifiées, en s'inspirant des travaux de [**Knezevic et al. 2013**]. Un processus d'identification inverse, prenant en compte la sensibilité aux paramètres de sollicitations et se focalisant sur le comportement asymptotique, est proposé et utilisé en s'appuyant sur les études expérimentales de [**Salvo 2014**] (lot faible densité) et [**Ben Saada 2017**].

Dans la troisième et dernière partie, le modèle d'ordre réduit est développé au problème en question. Plus précisément, dans le chapitre V, le modèle d'ordre réduit basé sur l'approche NTFA s'appuyant sur différentes approximations et notamment la linéarisation TSO à l'ordre deux des potentiels de dissipation, est appliquée. Les différentes étapes de la NTFA sont précisées et détaillées. Il s'ensuit dans le chapitre VI la présentation d'une façon de construire les modes alimentant le modèle d'ordre réduit. Des comparaisons sont faites pour des essais de compression uniaxés entre les résultats expérimentaux [**Salvo 2014 ; Ben Saada 2017**], les résultats issus du modèle en champ complet (FFT) et ceux issus du modèle d'ordre réduit NTFA TSO aussi bien à l'échelle macroscopique que locale. Par suite, toujours dans ce chapitre VI, l'axe de chargement est pris triaxé, puis quelconque. La base modale servant dans le modèle d'ordre réduit est précisée. La comparaison est faite aux deux échelles entre le modèle d'ordre réduit et le modèle en champ complet. Finalement, dans le chapitre VII, une manière de prendre en compte, au sein du modèle NTFA TSO, les conditions de sollicitation, la température et la vitesse de déformation, est présentée. Encore une fois, les résultats numériques issus du modèle en champ complet sont comparés à ceux issus du modèle d'ordre réduit NTFA. La comparaison est faite aux deux échelles et pour des axes de chargement uniaxés puis triaxés.

Pour finir, ce manuscrit se termine par une conclusion et discussion de certains choix faits. Des perspectives sont également présentées.

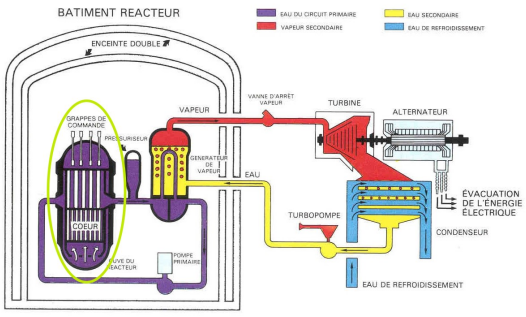
Première partie

Contexte et étude bibliographique

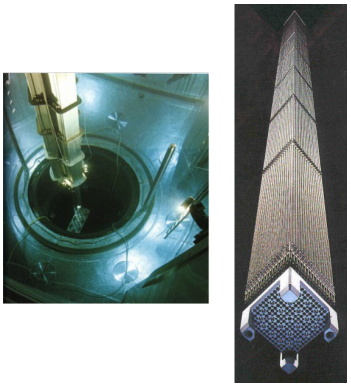
Chapitre I

Contexte et problématique industrielle - Le comportement mécanique de l'UO_2 en condition accidentelle de type RIA

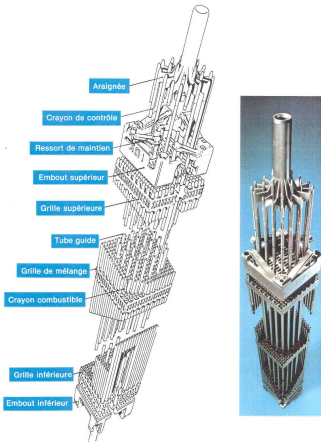
I.1 Du réacteur à eau pressurisée à la pastille combustible



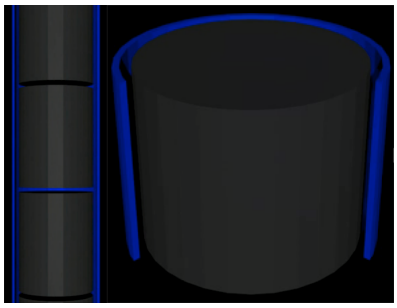
(a) Schéma d'une tranche d'un REP. La cuve du réacteur est entourée en vert clair.



(b) Image d'une cuve (à gauche) et d'un assemblage (à droite).



(c) Vue éclatée des éléments constitutifs d'un assemblage.



(d) Schéma éclaté Pastille (grise) - Gaine (bleu).

FIGURE I.1 – De la centrale à la pastille combustible.

I.1.1 Du réacteur à eau pressurisée à la cuve du circuit primaire

Il existe deux familles de réacteurs : les réacteurs à neutrons rapides (neutron issu de la réaction de fission - vitesse et énergie cinétique importante) et les réacteurs à neutrons thermiques (énergie et vitesse plus faible). Le choix a été fait dans les années 1970 d'orienter le parc nucléaire français vers cette dernière famille avec la construction de plusieurs réacteurs à eau pressurisée (REP) tout en gardant une expertise au sein des réacteurs à neutrons rapides. Ce choix a été motivé par plusieurs raisons dont l'absence de contact entre les circuits primaire-secondaire avec l'environnement (cf. Fig. I.1-(a)) et la présence de trois barrières de sécurité en cas d'incidents ou d'accidents.

Les REP sont des réacteurs qui utilisent l'eau comme fluide caloporteur. Ils sont constitués de trois circuits dont les deux premiers sont fermés. Le circuit primaire génère la chaleur qui est transportée par l'eau sous forme liquide. Le circuit secondaire vaporise son eau via des échangeurs thermiques avec le circuit primaire. C'est cette vapeur qui entraîne des turbines qui vont à leur tour entraîner des alternateurs afin de produire l'électricité des centrales. Un circuit tertiaire est présent pour refroidir l'eau du circuit secondaire et la liquéfier via des échangeurs thermiques. Ceci est illustré sur la figure Fig. I.1-(a).

Ces réacteurs présentent trois barrières de sûreté : la première est constituée de la gaine confinant le combustible à l'intérieur du crayon, la seconde est constituée du circuit primaire qui est fermé et finalement la dernière barrière est constituée d'une enceinte en béton, confinant le circuit primaire et dimensionnée dans l'éventualité d'une vaporisation totale de l'eau de ce circuit.

I.1.2 De la cuve du circuit primaire à l'assemblage

La cuve du circuit primaire (Fig. I.1-(b)) est constituée de multiples assemblages de crayons combustibles plongés dans de l'eau pressurisée. L'eau s'échauffe de 30 à 40 $[°C]$ entre le bas et le haut du réacteur. Celle-ci entre dans la cuve du réacteur à 285 $[°C]$ et en sort à environ 320 $[°C]$. L'eau du circuit primaire est pressurisée à 155 $[bar]$ afin de la maintenir à l'état liquide en fonctionnement normal. La température d'ébullition de l'eau à 155 $[bar]$ est de 345$[°C]$.

Il y a en France 56* réacteurs à eau pressurisée de 900 $[MWe]$ ($\times 32$), 1350 $[MWe]$ ($\times 20$) et 1450 $[MWe]$ ($\times 4$). Ils contiennent respectivement 157, 193 et 214 assemblages. Un réacteur de 1600 $[MWe]$ est en cours de construction : EPR (initialement European Pressurized Water Reactor, puis Evolutionary Power Reactor) Flamanville-3, réacteur à eau pressurisée de génération III.

I.1.3 De l'assemblage au crayon combustible

L'assemblage (Fig. I.1-(c)) au sein d'un REP est un réseau à pas carré 17×17 contenant 264 crayons combustibles, 24 tubes guides servant à l'introduction des barres de contrôle et un tube d'instrumentation central. L'ensemble est rigidifié par 8 grilles de maintien, serties sur les tubes-guides par l'intermédiaire de manchons. Plusieurs éléments viennent s'insérer dans les alvéoles de ces grilles et y sont maintenues. Il y a notamment les crayons combustibles qui sont maintenus dans chaque alvéole entre deux bossettes et un ressort en Inconel. L'araignée de contrôle est constituée de barres de contrôle ce qui permet de réguler la réactivité du réacteur en insérant de façon plus ou moins importante ces barres de contrôle au sein des tubes guides. Des ailettes de mélanges sont présentes sur les grilles de maintien afin d'homogénéiser le fluide réfrigérant dans l'assemblage. Des lumières sont aménagées pour permettre le passage des grappes de commande du réacteur (ou barres de contrôle) et du réfrigérant.

Le crayon combustible au sein d'un REP (illustré Fig. I.2) d'une longueur variable (suivant la puissance du REP) est quant à lui constitué d'un empilement de pastilles combustibles insérées dans une gaine cylindrique (épaisseur : $\sim 570\,[\mu m]$) en alliage de Zirconium. Dans un REP 900 $[MWe]$

∗. Les réacteurs $n°1$ et $n°2$ de Fessenheim sont définitivement arrêtés respectivement depuis le 22 février 2020 et le 29 juin 2020. EDF possédait 58 REP en 2019.

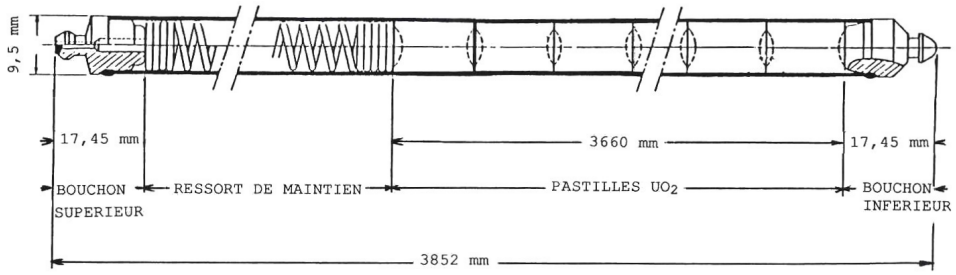
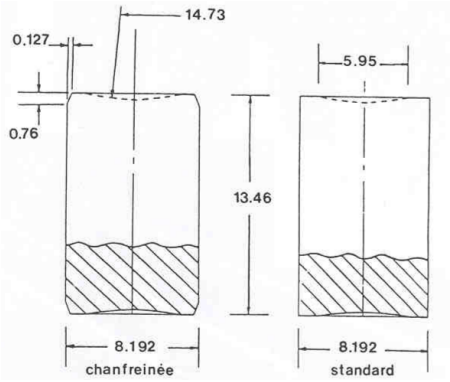


FIGURE I.2 – Dimensions et éléments constitutifs d'un crayon combustible REP 900 $[MWe]$.

(Méga Watt électrique), l'empilement des pastilles est d'une longueur d'environ 3.6 $[m]$ ce qui équivaut approximativement à 265 pastilles. Un ressort (Inconel) de maintien, situé dans la chambre d'expansion et s'appuyant sur le bouchon supérieur, permet d'éviter les espaces inter-pastilles et de maintenir ces dernières en place. La chambre d'expansion, l'espace pastille gaine, l'espace inter pastille (évidemment des pastilles) et les chanfreins constituent les volumes libres du crayon combustible. Enfin, le crayon est pressurisé à l'hélium ($\sim 15 - 30\,[bar]$ - bon conducteur) et l'air ($1\,[bar]$) ceci afin d'éviter une augmentation trop brutale de pression interne et de diminuer la différence de pression avec l'extérieur de la gaine (pression de l'eau $155\,[bar]$). Le fait d'utiliser de l'hélium permet également d'avoir une meilleure conductivité thermique tant que le jeu pastille gaine n'est pas fermé. À l'issue de sa fabrication, le crayon est donc parfaitement étanche et constitue la première barrière de sécurité.

I.1.4 La pastille combustible UO_2



(a) Dimensions de la pastille en $[mm]$.

Pré compactage	90 $[MPa]$
Mise en forme	350 $[MPa]$
Masse à cru	5.78 $[g][cm]^3$
Après frittage	
Masse volumique	10.48 $[g][cm]^3$
Porosité totale	4.38 %
Porosité ouverte	0.1 %
Porosité fermée	4.28 %
Taille des grains	12 $[\mu m]$
Stabilité thermique	0.56 %

(b) Caractéristiques de la pastille combustible.

FIGURE I.3 – Caractéristiques de la pastille de dioxyde d'uranium après fabrication.

La pastille combustible de dioxyde d'uranium (voir illustration Fig. I.3-(a) et caractéristiques Fig. I.3-(b)) est obtenue par différentes étapes de fabrication et au final par un frittage de la poudre de dioxyde d'uranium pré-compactée. Elle est ensuite travaillée et usinée aboutissant à un diamètre et une hauteur respective de $\varnothing_{ext} = 8.19\,[mm]$ et $h = 13.5\,[mm]$. La pastille est chanfreinée ce qui permet de l'insérer plus facilement dans le tube de gainage et d'éviter les rayures avec cette dernière, rayures qui peuvent localiser les contraintes et sur-solliciters la gaine localement. Les chanfreins accommodent également la mise en diabolo de la pastille lors du fonctionnement normal, ce qui évite de localiser les contraintes en conditions normales mais également et surtout en conditions incidentelles (rampe de puissance) et accidentelles (RIA). La pastille est évidée afin de permettre l'accommodation du gonflement gazeux et du fluage thermique de la pastille en conditions incidentelles et accidentelles.

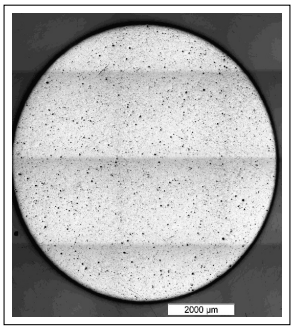
Il y a un jeu entre la pastille et la gaine d'environ 80 $[\mu m]$.

La pastille combustible après frittage comporte des porosités de fabrication ($\sim 4.38\,\%$) dont la majeure partie est fermée. La taille des porosités est variable et est comprise entre le nanomètre et la dizaine de micromètres. La répartition et le spectre des porosités sont uniformes sur l'ensemble de la pastille.

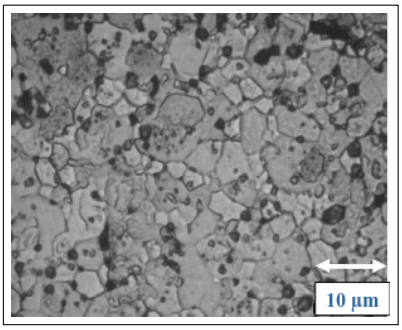
Lors des essais de **[Salvo 2014]**, essais qui sont détaillés dans la suite du document car ils sont en lien étroits avec ce sujet de thèse, nous informons le lecteur que les pastilles combustibles présentent une répartition et un spectre de porosités différents en comparaison avec les pastilles combustibles utilisées en réacteur commercial. Il y a peu de pores (13 % du nombre total de pores) en intergranulaire aux Joints de Grains (JdG) mais ceux-ci représentent 80 % de la porosité totale avec une taille moyenne de $\sim 2.1\,[\mu m]$. Au contraire, il y a un nombre important (87 %) de pores en intragranulaire, mais ceux-ci ne représentent que 20 % de la porosité totale avec une taille moyenne de $\sim 0.4\,[\mu m]$. La taille des grains est elle aussi uniforme sur l'ensemble de la pastille avec 67% des grains ayant une taille inférieure à $\sim 10\,[\mu m]$ et 97 % une taille inférieure à $\sim 20\,[\mu m]$.

I.2 Phénomènes et état de la pastille UO_2 en fonctionnement normal

(a) Photo de pastille UO_2.



(b) Céramographie UO_2.



(c) Microscopie optique UO_2.

FIGURE I.4 – Images, céramographie, et image au microscope optique de la pastille UO_2 à l'état vierge (hors irradiation).

La pastille combustible de dioxyde d'uranium est une céramique. Elle est fragile à basse température ($T <\sim 1000 - 1200\,[°C]$) et ductile à haute température ($\sim 1300 - 1400 < T\,[°C]$). C'est un polycristal : à l'échelle microscopique (voir Fig. I.4-(c)), le dioxyde d'uranium est constitué de grains de tailles variables présentant une orientation propre.

I.2.1 Description succincte du comportement thermique de la pastille UO_2 au sein d'un crayon REP irradié en fonctionnement normal

Lors du fonctionnement normal, la température et la puissance ne sont pas uniformes dans la pastille combustible. Ceci peut s'expliquer par plusieurs facteurs. Tout d'abord et pour des raisons neutroniques, dans la zone périphérique de la pastille il y aura au début fission de ^{235}U puis rapidement capture de ^{238}U qui produira ^{239}Pu (élément fissile). Dans la zone centrale il y aura fission de ^{235}U. En conséquence, la zone périphérique générera plus de puissance que la zone centrale (présence de deux éléments fissiles : ^{235}U et ^{239}Pu). Cette dépression de puissance est d'autant plus marquée que l'enrichissement est faible et que le combustible est irradié. De plus, le combustible est mauvais conducteur ce qui ne favorise pas les échanges de chaleurs avec le fluide caloporteur qui entoure le

crayon combustible. Il y a un gradient de température entre le centre (température élevée) et la périphérie (température faible) de la pastille. La température aura un profil parabolique inversé (cf. Fig. I.5). Certains phénomènes peuvent s'ajouter à la mauvaise conductivité du combustible : le jeu (en début d'irradiation) entre la pastille et la gaine peut être pollué par le relâchement des gaz de fission issus de la pastille (xénon et krypton : produits de fission gazeux majoritairement produits et relâchés au sein d'un crayon de combustible UO_2 et ayant de très mauvaises conductivités), une couche externe sur la gaine en zircone (couche de ZrO_2 qui se développe suite à la corrosion de la gaine au contact du caloporteur), une couche limite externe (film d'eau entre la zircone externe et le fluide caloporteur) qui a des propriétés différentes de l'eau (couche limite) et une couche de zircone interne dense qui se développe entre le combustible et la face interne de la gaine lorsque le contact pastille gaine est établi localement (la couche de zircone interne se créant par diffusion de l'oxygène du combustible vers la gaine). On peut ainsi observer un écart de température entre le centre et la périphérie de la pastille de $400 - 700[°C]$ en fonctionnement normal ($T_{Centre} \sim 1000[°C]$). Il est a noter qu'un écart à la stoechiométrie (rapport Oxygène sur Uranium) à la fabrication dégradera la conductivité thermique de la pastille. Au cours de l'irradiation en fonctionnement normal, il est important de souligner au lecteur que la conductivité thermique de la pastille se dégrade due à : la création de défauts, la modification de la composition (créations de produits de fissions sous différentes formes : solides, céramiques, gazeuses, etc.), l'évolution spatiale et spectrale des porosités de fabrication, l'apparition et la précipitation de bulles intra et inter-granulaires (bulles pressurisées en gaz de fission avec des rayons, des morphologies et des fractions volumiques variables suivant la zone radiale de la pastille considérée et le degré d'irradiation considéré) au sein de la pastille UO_2.

Axialement, le profil de puissance n'est également pas homogène. La zone centrale est plus ou moins homogène. Il y a des effets de bords en haut et en bas du crayon combustible. En d'autres termes, les pastilles UO_2 au sein d'un crayon REP se comportent également différemment axialement du point de vue thermique.

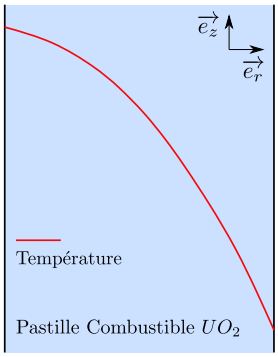


FIGURE I.5 – Illustration du profil parabolique de température régnant dans la pastille UO_2 en fonctionnement normal.

I.2.2 Description succincte du comportement mécanique de la pastille UO_2 au sein d'un crayon REP irradié en fonctionnement normal

Comme énoncé plus haut, la pastille a un comportement mécanique à seuil (seuil de température). Elle a un comportement élastique fragile ($\sigma^{El} \equiv \sigma^{Rup}$) à basse température et élasto viscoplastique à haute température (domaine élastique puis viscoplastique une fois la limite d'élasticité dépassée ; la pente d'écrouissage ainsi que la limite d'élasticité dépendent de la vitesse de déformation). Pour une échelle suffisamment grande*, un Volume Élémentaire Représentatif (VER) d'un polycristal (~ 500 grains) de dioxyde d'uranium peut être vu comme un milieu globalement isotrope. Sa matrice d'élasticité $\boldsymbol{L}$ est complètement définie par deux coefficients matériaux effectif : le module d'Young E

et le coefficient de poisson ν. Le module d'Young effectif diminue lorsque la température, la porosité (porosité : pores de fabrication et bulles), et le taux de combustion (Burn Up en $[GW].[tM]^{-1}$ ou en $[MWj].[tM]^{-1}$) augmentent. Le coefficient de poisson est lui indépendant de la température et du taux de combustion, mais diminue lorsque la porosité augmente. Avant de décrire plus globalement les phénomènes subis par le crayon combustible REP en fonctionnement normal et de surcroît les phénomènes subis par la pastille d'UO_2, les différentes déformations induites au sein de la pastille UO_2 sont présentées succinctement via Eq. I.1. Il est à noter qu'il peut y avoir des couplages entre ces déformations. Suivant les zones radiales considérées de la pastille UO_2, les amplitudes de ces déformations peuvent être plus ou moins exacerbées, car les phénomènes à l'origine de celles-ci sont dépendants de variables comme la température et le taux de combustion (≡ Burn-Up) par exemple.

$$\varepsilon_{t} = \varepsilon_{e} + \varepsilon_{vp}^{th} + \varepsilon_{irr}^{vp} + \varepsilon_{th} + \varepsilon_{fiss} + \varepsilon_{gs} + \varepsilon_{gg} + \varepsilon_{gg}^{\boldsymbol{hbs}} + \varepsilon_{dens}$$

Avec :

ε_{t}	Tenseur des déformations totales.	[−]
ε_{e}	Tenseur des déformations élastiques.	[−]
ε_{vp}^{th}	Tenseur des déformations visco-plastiques - Propre à un certain domaine de température (fluage thermique).	[−]
ε_{irr}^{vp}	Tenseur des déformations visco-plastiques induites par les pointes de fission nucléaires (fluage induit par l'irradiation).	[−]
ε_{th}	Tenseur des déformations thermiques.	[−]
ε_{fiss}	Tenseur des déformations induites par la fissuration macro-scopique de la pastille.	[−]
ε_{gs}	Tenseur des déformations de gonflement induites par les produits de fission solides.	[−]
ε_{gg}	Tenseur des déformations de gonflement induites par les produits de fission gazeux qui précipitent sous formes de bulles au sein des zones radiales saines de la pastille.	[−]
$\varepsilon_{gg}^{\boldsymbol{hbs}}$	Tenseur des déformations de gonflement induites par les produits de fission gazeux qui précipitent sous forme de bulles au sein des zones radiales restructurées de la pastille et nommées zone High Burn up Structure (HBS).	[−]
ε_{dens}	Tenseur des déformations de retrait induites par la disparation des nano-porosités de fabrication sous l'effet des pointes de fissions nucléaires (phénomène de densification).	[−]

(I.1)

Dans la suite de ce document et du point de vue mécanique, le comportement du combustible UO_2 sera présenté tout en utilisant les termes de Eq. I.1. Cette évolution du comportement mécanique de la pastille UO_2 sera fonction du temps et plus particulièrement de l'historique de puissance subi par le crayon. Les différents éléments pouvant jouer un rôle dans le comportement mécanique de la pastille UO_2 sont en fonctionnement normal :

- ♢ La position radiale r considérée au sein de la pastille combustible (exemples : périphérie, mi-rayon ou centre).
- ♢ La position axiale de la pastille au sein du crayon combustible.
- ♢ L'évolution temporelle des porosités (pores de fabrication et bulles de gaz de fission) radialement et axialement au sein de la pastille UO_2 : Tailles - Positions (Intergranulaire - Intragranulaire) - Formes.
- ♢ L'évolution temporelle de la densité du combustible radialement et axialement au sein de la pastille UO_2.
- ♢ L'évolution temporelle de la stoechiométrie (rapport $\chi_{O/M}$ - O oxygène et M métal) radiale-

∗. Pour rappel : Taille de grain $\sim 12\,[\mu m]$, diamètre de la pastille $\varnothing = 8,19\,[mm]$.

ment et axialement au sein de la pastille UO_2.

- ♢ L'évolution temporelle des quantités de Produits de Fission (produits de fissions sous différentes formes : solides, gazeux, céramiques, métalliques ...) radialement et axialement au sein de la pastille UO_2.
- ♢ L'évolution temporelle de la taille des grains radialement et axialement au sein de la pastille UO_2*.
- ♢ L'évolution temporelle des profils radiaux et axiaux des chargements suivants :
  - ► La puissance et de surcroît la température†.
  - ► Les contraintes, déformations et vitesse de déformations.

Dans la communauté internationale, l'hypothèse de l'invariance par rotation est souvent faite : hypothèse appliquée au crayon combustible et de surcroît aux pastilles d'UO_2. La positon axiale des pastilles UO_2 dans le crayon n'interviendra pas explicitement dans la suite du document : les comportements différents entre deux pastilles UO_2 positionnées à des cotes axiales différentes du crayon combustible sont seulement gouvernés par des conditions axiales de chargements différentes (exemple puissance). Du fait du respect de la stœchiométrie des pastilles combustibles UO_2 à la fabrication ($\chi_{O/M} = 2.000$), l'écart à la stoechiométrie ne sera pas considéré.

Comme en élasticité, le tenseur des dilatations thermiques est considéré isotrope et le tenseur des déformations thermiques au sein de la pastille UO_2 est explicité Eq. I.2.

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{th}} = \boldsymbol{\alpha}\Delta T \tag{I.2}$$

Avec :

$\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{th}}$	Tenseur des déformations thermiques.	$[-]$
$\boldsymbol{\alpha}$	Tenseur de dilatation thermique.	$[K]^{-1}$
ΔT	Différence de température entre deux points de la pastille UO_2.	$[K]$

Il est à noter que la pastille combustible subit également un fluage thermique, fluage traduit dans l'équation Eq. I.1 par le tenseur des déformations $\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathsf{th}}_{\mathsf{vp}}$, pour des températures supérieures à $1000\,[°C]$, principalement par diffusion des lacunes pour $T \in [1000, 1300]\ [°C]$ et faibles contraintes avec un exposant de 1 (loi de type Norton : exposant de la loi puissance reliant vitesse de déformations et contraintes) et par mouvement des dislocations pour des températures supérieures à $1300\,[°C]$ et à fortes contraintes avec un exposant de 4-5 (loi de type Norton : exposant de la loi puissance reliant vitesse de déformations et contraintes).

En fonctionnement normal REP, il est à remarquer que les pastilles UO_2 dépassent rarement $T = 1000\,[°C]$ au centre : elles ne subissent donc pas de fluage thermique. Elles ont donc un comportement thermo-élastique fragile : au sein de l'équation Eq. I.1 la déformation élastique est donnée par $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{e}}$, la déformation thermique est donnée par $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{th}}$ et l'aspect fragile de la pastille est traduit de façon phénoménologique (modèle qui est présenté plus loin dans le document) par la déformation $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{fiss}}$. En réalité et en plus de ces déformations, la pastille d'UO_2 subit en fonctionnement normal des déformations anélastiques, induites par des phénomènes qui ne sont pas détaillées dans le document car celles-ci sont peu influentes lors d'un RIA. Ces déformations sont les suivantes :

- ♢ Déformation induite par le fluage d'irradiation de la pastille en dessous de $T < 1000\,[°C]$: $\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathsf{vp}}_{\mathsf{irr}}$ au sein de l'équation Eq. I.1.
- ♢ Déformation de gonflement induite par les produits de fission solide : $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{gs}}$ au sein de l'équation Eq. I.1.
- ♢ Déformation de gonflement induite par les produits de fission gazeux qui précipitent sous formes de bulles au sein des zones radiales saines de la pastille : $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{gg}}$ au sein de l'équation Eq. I.1.

∗. Pour information, en fonctionnement normal cette évolution temporelle est négligeable.

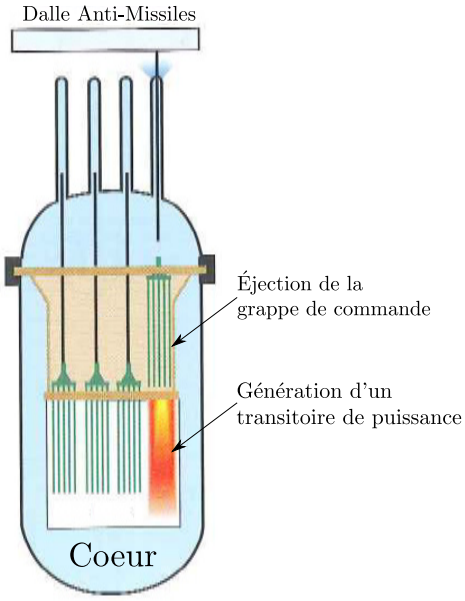
†. Pour information, implicitement l'intégrale de la puissance sur le temps traduit un effet du taux de combustion en $[MWj].[tM]^{-1}$ ou en $[GWj].[tM]^{-1}$.

♢ Déformation de gonflement induite par les produits de fission gazeux qui précipitent sous forme de bulles au sein des zones radiales restructurées de la pastille et nommées zone High Burn up Structure (HBS) : ε_{gs}^{hbs} au sein de l'équation Eq. I.1.

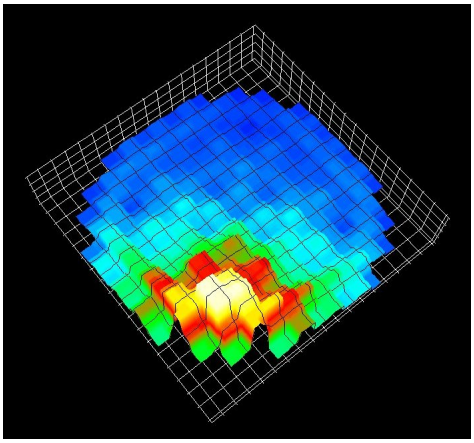
♢ Déformation de retrait induite par la disparation des nano-porosités de fabrication sous l'effet des pointes de fissions nucléaires (phénomène de densification) : ε_{dens} au sein de l'équation Eq. I.1.

I.3 Comportement du combustible UO_2 en condition accidentelle de type RIA

I.3.1 L'accident de type RIA aux différentes échelles du réacteur



(a) Représentation schématique de la rupture du mécanisme de commande entrainant une éjection de la grappe de contrôle.



(b) Cartographie 2D (r, θ) : Répartition spatiale de la puissance émise lors d'un transitoire de type RIA. Un carré représente un assemblage combustible.
Les couleurs représentent les iso valeurs de la puissance au sein du coeur dans le plan (r, θ). La Zone Rouge-Jaune correspond à la zone d'éjection de grappes qui se traduit par une augmentation locale de la puissance au sein du coeur.

FIGURE I.6 – Représentation schématique d'un accident d'insertion de réactivité (RIA) ainsi que la répartition de la puissance générée (lors d'un RIA) au niveau du coeur du réacteur.

L'Accident d'Insertion de Réactivité (Reactivity Initiated Accident - RIA) est une condition accidentelle de classe 4 pouvant survenir lors du fonctionnement des réacteurs nucléaires. Cet accident a une fréquence d'apparition inférieure à 10^{-4} par tranche et par an* [**Salvo 2014**].

Cet accident survient au niveau du circuit primaire, plus précisément au niveau de la cuve. Cet accident d'insertion de réactivité ou RIA, illustré schématiquement Fig. I.6-(a), se traduit par la rupture du mécanisme contrôlant les grappes de contrôles. Du fait de la différence de pression entre l'intérieur du coeur (pression interne à $155\,[bar]$) et l'extérieur du coeur (pression atmosphérique), la grappe de contrôle en question est immédiatement éjectée. Ces barres permettent de maintenir la

∗. 56 tranches - 4-5 ans de fonctionnement $\rightsquigarrow P_{RIA} \lesssim 2.80 \times 10^{-2} (= 10^{-4} \times 56 \times 5)$.

réaction sous contrôle. Une fois expulsée, la réaction devient critique et elle s'emballe localement, i.e. dans la zone des assemblages et de surcroît des crayons où la grappe de contrôle a été éjectée (cf. Fig. I.6-(b)), sur un intervalle de temps court (quelques $[ms]$).

Bien que la réaction générée lors d'un accident de type RIA soit limitée dans le temps, celle-ci se traduit au niveau des crayons et donc de l'ensemble pastilles gaines par un pulse de puissance. Ce pulse associé au crayon portant le point chaud est défini par sa largeur à mi-hauteur (temps caractéristique) et par l'énergie totale déposée. L'énergie totale déposée est directement liée au taux de combustion moyen du crayon irradié en fonctionnement normal. En effet, il est important de souligner que plus le taux de combustion moyen du crayon sera élevé i.e. avant que ne survienne l'accident de type RIA, et moins l'énergie déposée lors du pulse RIA de puissance sera importante. Les conséquences de cet accident sont fortement dépendantes des caractéristiques du pulse (dépôt d'énergie et largeur) ainsi que de l'état micro structural du combustible UO_2. Par extension, les conséquences dépendent du taux de combustion de la pastille combustible avant que l'accident ne survienne.

Plus la largeur à mi-hauteur est faible, plus le pulse sera piqué. En d'autres termes, à énergie équivalente, l'énergie sera déposée plus rapidement sur l'ensemble pastille gaine. Au niveau de la pastille UO_2 ce pulse de puissance se traduit par une augmentation brutale quasiment adiabatique de la température. La rapidité du dépôt empêche les échanges thermiques avec l'extérieur. La température a un profil quasi homogène sur l'ensemble du combustible excepté à la périphérie où le profil est piqué (température plus importante) et à l'extrême périphérie où la température est proche de celle du caloporteur. Ce pic dépend des caractéristiques du pulse. Ce dernier se déplace vers le centre de la pastille tout en s'atténuant avec le temps. En fin d'accident, le profil de température retrouve un profil de fonctionnement normal à savoir parabolique inversé. Selon les caractéristiques du pulse les températures atteintes sont différentes. Pour un pulse très sollicitant, le centre de la pastille peut voir des températures de l'ordre de 2000 $[°C]$ et des températures de l'ordre de 2500 $[°C]$ au niveau du pic (pic de température). Il est à souligner que la température de fusion du combustible vierge est de l'ordre de $\sim 2800\,[°C]$. Outre cette augmentation brutale de température, le combustible subit dans le même intervalle de temps une vitesse de déformation macroscopique importante ($\dot{\bar{\varepsilon}} \in [10^{-1}, 1.0]\,[s]^{-1}$).

En résumé le RIA est un transitoire rapide de puissance se caractérisant par un dépôt d'énergie conséquent localement (zone où la grappe de contrôle est éjectée) au sein du cœur du réacteur ce qui peut affecter l'intégrité des crayons combustibles au sein de cette zone. Au niveau du crayon combustible portant le point chaud, plusieurs scénarios peuvent être envisagés. Dans le pire des cas, cet accident pourrait aboutir à une rupture de la gaine du crayon combustible, suivie d'une dispersion des fragments de combustibles inférieurs à la taille de la brèche et d'une vaporisation locale du fluide caloporteur en contact avec ces fragments de combustibles. Lors de ce transitoire de type RIA, il est à souligner que la gaine du crayon combustible peut rompre par exemple par IPG (Interaction Pastille Gaine) mécanique : l'IPG mécanique (IPG_m) étant générée par les déformations thermique et de gonflement gazeux de la pastille imposées à la gaine lors du transitoire. Au niveau de la pastille combustible UO_2 cet accident se traduit par une augmentation brutale et quasiment adiabatique de la température. Il s'accompagne d'une vitesse de déformation importante sur un intervalle de temps de l'ordre de la dizaine de millisecondes. Lors de ce pulse RIA le combustible UO_2 possède a priori (cf. chapitre II) un comportement élasto-viscoplastique non linéaire et il subit sur une zone radiale de combustible plus ou moins prononcée, sous compression bi-axée (voire tri-axé) très élevée ($\bar{\sigma} \sim 900\,[MPa]$ pour les pulses les plus énergétiques - Zone où la température est élevée, ainsi que le gradient radial de température), une décohésion des joints de grains par endommagement a priori ductile. Cette zone de décohésion des joints de grains est d'autant plus importante radialement dans le combustible que la largeur du pulse est réduite et que l'énergie déposée y est conséquente. Cette décohésion peut conduire à une sur-fragmentation (fragments issus de l'irradiation de base d'environ 2

†. Pour une largeur à mi-hauteur de l'ordre de la dizaine de millisecondes, la cinétique est dite rapide. Pour une largeur de l'ordre de plusieurs dizaines de millisecondes la cinétique est dite lente. [**Sercombe 2017**]

à 3 [mm] qui se retrouvent sur-fragmentés en des fragments inférieurs à 2-3 [mm] lors du pulse) locale du combustible avec des fragments de petites dimensions. Ces décohésions et sur-fragmentations peuvent induire un relâchement des gaz de fission inter-granulaires : gaz qui étaient présents en fonctionnement normal à l'état dissous ou précipités sous forme de bulles. Ce relâchement des gaz de fission peut lui-même induire une augmentation locale de pression interne dans le crayon et conduire à une sollicitation supplémentaire sur la gaine (sollicitation supplémentaire en plus des déformations thermique et de gonflement imposées par la pastille à la gaine), ce qui peut éventuellement déclencher un phénomène de ballonnement de la gaine et notamment en cas d'entrée en crise d'ébullition du caloporteur. Par conséquent et en cas de rupture de la gaine (rupture par IPG_m ou par ballonnement éclatement), les fragments de petites dimensions pourraient éventuellement être pulvérisés hors de la gaine en cas d'ouverture de brèche suffisamment importante.

I.3.2 Transitoires RIA intégraux (structure crayon combustible UO_2) réalisés dans le réacteur CABRI et non rompus - REP Na 2-3-4-5-11

Dans cette partie, les transitoires n'ayant pas conduit à des ruptures de crayons ont été choisis. Ce choix est volontaire car dans le cadre de cette thèse, nous cherchons uniquement à modéliser le comportement du combustible UO_2 sous des sollicitations mécaniques (contraintes, déformations et vitesses de déformations) représentatives d'un transitoire type RIA et ce avant que la rupture du crayon combustible ne survienne. La première sous partie s'attache à présenter les observations et commentaires de ces essais intégraux non rompus en lien avec ce travail de thèse. Celle-ci se base sur les travaux de thèses de [**Salvo 2014**] ainsi que des documents de [**Papin et al. 2003**] et de [**Sercombe 2017**]. Un tableau, regroupant une partie des données jugées pertinentes, servira de support pour les observations et les commentaires. La deuxième sous partie présentera la simulation d'un essai expérimental nommé REP-Na 5 via le code de calcul SCANAIR [**Moal 2011**] (code de simulation du comportement thermomécanique du crayon combustible en RIA développé par l'Institut de Radioprotection et de la Sûreté Nucléaire IRSN - code de référence pour réaliser les études de sûretés en RIA) : l'objectif de cette simulation, réalisée dans le cadre de cette thèse, était de déterminer quantitativement les « niveaux » de sollicitations mécaniques (intensités de contraintes, déformations, et vitesses de déformations - triaxialité associée) subies par la pastille UO_2 en condition de RIA et ce afin de pouvoir dans la suite de cette thèse appliquer ces niveaux de sollicitations mécaniques lors du développement et la validation de la loi de comportement mécanique du combustible UO_2 en RIA, basée sur l'approche NTFA.

I.3.2.1 Observations et commentaires des essais intégraux non rompus

Les crayons combustibles analysés dans le cadre de cette thèse et testés en condition de RIA au sein du réacteur expérimental CABRI sont les suivants : les crayons fils (tronçons de crayons de tailles : $\sim 60\,[cm]$) nommés REP-Na 2-3-4-5, qui sont issus de segments de crayons père ayant subi au moins deux cycles au sein d'un REP industriel. Le fluide caloporteur utilisé au sein de ces essais est le sodium. En comparaison d'un accident de type RIA qui surviendrait au sein d'un REP, i.e. avec un caloporteur en eau pressurisée, le caloporteur au sodium permet d'avoir une bonne approche du comportement du crayon combustible REP sur la première phase du transitoire RIA (IPGm) en se prémunissant de la crise d'ébullition susceptible d'entraîner la formation d'un ballon. Avant de réaliser les transitoires de type RIA sur ces crayons fils, il est important de souligner que les pastilles constituant chacune des colonnes combustibles de ces crayons fils présentaient des fissurations macroscopiques issues de l'irradiation en fonctionnement normal. Ces fragments sont de formes « prismatiques » et d'une longueur moyenne de l'ordre de $l_{moy} \sim 2-3\,[mm]$. Avant réalisation des transitoires de type RIA, ces pastilles comportaient des produits de fissions gazeux en intra et en inter-granulaire. La part de gaz de fission en inter-granulaire, à l'issue de l'irradiation de base a été

estimée sur chaque crayon fils à l'aide d'un code de simulation du comportement thermomécanique du crayon combustible nommé ALCYONE [**Sercombe 2017**]. La zone HBS, formée sur ces pastilles UO_2 avant pulse RIA, a également été estimée à l'aide de ce code [**Sercombe 2017**]. Les résultats numériques des états microstructuraux des pastilles de chaque crayon fils sont présentés en haut du Tab. I.1 et ce avant qu'ils ne subissent les transitoires de type RIA.

Les conditions de sollicitations subies par chaque crayon fils lors de chaque transitoire RIA sont quant à elles présentées sur les lignes au milieu du Tab. I.1.

Enfin, les résultats expérimentaux et numériques des états microstructuraux des pastilles (fissures radiales secondaires générées lors du transitoire RIA, taux de comblement des évidements des pastilles et zones radiales des pastilles affectées par l'endommagement (décohésion) des Joints de Grain : J.d.G) de chaque crayon fils, après ces transitoires de type RIA, sont présentés sur les lignes en bas du Tab. I.1. Sur ces lignes sont également présentées des grandeurs d'intérêts mesurées ou estimées numériquement sur chaque crayon fils, après ces transitoires de type RIA, comme par exemple la déformation tangentielle maximale de la gaine après essai, la fraction et le volume de gaz de fission relâchés au sein des volumes libres de chaque crayon fils après essai.

	REP-Na 2	**REP-Na 3**	**REP-Na 4**	**REP-Na 5**	**REP-Na 11**
État à l'issue de l'irradiation en fonctionnement normal					
Taux de Combustion max $[GWj].[tM]^{-1}$	33	53	62	64	63
Enrichissement U^{235} [%]	6.85	4.5	4.5	4.5	4.5
Nombre de Cycles	2	4	5	5	5
Largeur de la zone HBS formée en partant du bord de la pastille $[\mu m]$	Non formée	100	200	200	153-304
Proportion de Gaz Intergranulaire [%] (Simulation)	5.3	18.1	16.1	17.5	18.8
Pulse - RIA - Conditions de sollicitations appliquées					
Largeur mi hauteur $[ms]$	9.1	9.5	76.4	8.8	31
Enthalpie max $[cal].[g]^{-1}$	199	124	87	108	92
Énergie injectée PFM $[cal].[g]^{-1}$	207 (0.4 $[s]$)	122 (0.4 $[s]$)	95 (1.2 $[s]$)	104 (0.4 $[s]$)	104 (1.2 $[s]$)
Résultats après transitoires RIA					
Déformation tangentielle gaine maximale [%]	3.4	1.7	0.39	1.02	0.26
Fissurations radiales secondaires Nbr - Tailles en partant de la périphérie (Observation)	Métallographie Mauvaise qualité	~ 140 ~ 300 $[\mu m]$	~ 70 ~ 750 $[\mu m]$	~ 60 ~ 750 $[\mu m]$	~ 70 ~ 750 $[\mu m]$
Fissurations radiales secondaires Nbr - Tailles en partant de la périphérie (Simulation)	$40 \sim 750$ $[\mu m]$ $100 \sim 300$ $[\mu m]$	$50 \sim 750$ $[\mu m]$ $60 \sim 300$ $[\mu m]$	$30 \sim 750$ $[\mu m]$ $50 \sim 300$ $[\mu m]$	$50 \sim 750$ $[\mu m]$ Courtes Difficilement quantifiable	$50 \sim 750$ $[\mu m]$
Fissurations Circonférentielles (Simulation)	Périphérie	Périphérie et Mi-Rayon	-	Périphérie	-
Comblement des évidements	Total	Faible	Faible	Faible	Faible
Endommagement J.d.G. $[mm]$ en partant de la périphérie (Observation*)	Périphérie Mi-Rayon Centre	Périphérie 0.8	HBS	Périphérie 0.4	HBS
Endommagement J.d.G. $[mm]$ en partant de la périphérie (Simulation)	$\frac{2}{3}$ Rayon Périphérie	$\frac{1}{3}$ Rayon Périphérie	$\frac{1}{3}$ Rayon Périphérie	$\frac{1}{3}$ Rayon Périphérie	$\frac{1}{3}$ Rayon Périphérie
Fraction de Gaz Relâchée (FGR Xe et Kr) [%] (Observation)	5.9	13.7	8.2	14.7	6.8
Fraction de Gaz Relâchée (FGR Xe et Kr par rapport aux quantités produites) [%] (Simulation)	5.0	10	7	13	10
Volume de Gaz (Xe et Kr) relâché $[cm]^3$ (Observation)	24.4	47.1	44.6	77.1	36.4
Volume de Gaz (Xe et Kr) relâché $[cm]^3$ (Simulation 1D)	11	42	36	65	49

TABLEAU I.1 – Tableau récapitulant les différentes caractéristiques des essais non rompus. [**Papin et al. 2003**] [**Salvo 2014**] [**Sercombe 2017**]

Dans Tab. I.1, si l'analyse est portée sur le comportement mécanique de la pastille UO_2, il est à constater expérimentalement que les pastilles UO_2 présentent des fissures radiales secondaires traversantes et des zones de décohésion des Joints de Grains (JdG) après ces transitoires de type RIA. Comme énoncé par **[Salvo 2014]**, il existe une différence d'échelle entre ces deux termes. La décohésion se place à l'échelle du grain (échelle microscopique) tandis que la fissuration radiale secondaire se place à l'échelle macroscopique de la pastille. La pastille UO_2 subit des fissurations radiales et axiales macroscopiques lors de l'irradiation en fonctionnement normal (rappel : fragments de forme prismatiques et de longueurs moyennes de l'ordre de $l_{\text{moy}} \sim 2-3\,[mm]$). Lors de l'accident d'injection de réactivité, d'autres réseaux de fissurations, fissurations radiales secondaires macroscopiques (longueurs des fissures comprises entre $l \in [300, 750]\,[\mu m]$: cf. Tab. I.1), ainsi que de la décohésion des J.d.G peuvent être observés. Ces observations, l'expansion de ces réseaux de fissurations secondaires et de décohésion des J.d.G, dépendent de certains paramètres comme l'état avant pulse du combustible UO_2 (état microstructural du combustible avant le transitoire : proportion de gaz en inter-granulaire, proportion de ces gaz au sein des bulles inter-granulaires, présence ou pas de la zone HBS et largeur radiale de celle-ci. Cet état microstructural du combustible dépend de l'historique de puissance subi par le crayon père en fonctionnement normal et de surcroît du taux de combustion moyen crayon) et des caractéristiques du pulse envisagées (énergie injectée et largeur à mi hauteur du pulse).

Lors de ces transitoires RIA et concernant les Fractions de Gaz de fission (Xe et Kr) Relâchées (FGR) mesurées après essais, les expérimentateurs n'observent qu'une très faible contribution du relâchement de ces gaz par la diffusion thermique. Lors d'un transitoire de type RIA, la diffusion thermique des gaz de fission semble donc négligeable. Le relâchement des gaz observé proviendrait donc principalement des gaz situés en intergranulaire (gaz issus de l'irradiation de base) et ces gaz seraient relâchés par un phénomène mécanique (décohésion des J.d.G) et non par un phénomène de diffusion thermique des gaz.

En effet, au sein de Tab. I.1 il est à constater qu'il existe une corrélation entre les zones de décohésion affectées radialement au sein de la pastille UO_2, la fraction initiale de gaz inter-granulaire dans le crayon fils et la FGR de ce dernier après le transitoire RIA. Par exemple, la comparaison des essais nommés REP-Na 4-5 (Tab. I.1) indique que les pastilles issues de l'essai nommé REP-Na 4 possède un réseau de fissuration radiale secondaire relativement proche de l'essai REP-Na 5, mais une décohésion des J.d.G moins importante que celle au sein de l'essai nommé REP-Na 5, ce qui explique que la FGR est plus importante pour ce dernier. Il est à rappeler que les proportions de gaz en inter-granulaire au sein de ces deux crayons fils, REP-Na 4 et 5, sont numériquement relativement proches avant la réalisation des transitoires : respectivement $\sim 16.1\%$(REP-Na 4) *vs* $\sim 17.5\%$(REP-Na 5). De plus, les largeurs de la zone HBS formée sont également identiques : $\sim 200\,[\mu m]$. Au final, seules les zones radiales des pastilles affectées par la décohésion des J.d.G sont différentes entre les crayons REP-Na 4 et 5 : REP-Na 5 possède en effet (cf. Tab. I.1) une zone radiale de décohésion de J.d.G plus large radialement et plus prononcée. Ceci semble donc montrer que le relâchement des gaz de fission est à relier à la décohésion des J.d.G du combustible UO_2 en condition accidentelle de type RIA. Ceci montre également que la zone radiale de décohésion des J.d.G est plus large et prononcée radialement en fonction des caractéristiques du pulse de puissance : un pulse avec une largeur à mi hauteur de pulse réduite induit une décohésion des J.d.G plus large radialement et plus prononcée : cf. REP-Na 5 *vs* REP Na-4 au sein de Tab. I.1. De plus et à largeur de pulse quasi identique (largeur à mi hauteur), le pulse RIA où le dépôt d'énergie injectée est le plus important conduira systématiquement à une décohésion des J.d.G plus large radialement et ce de manière plus prononcée : cf. Tab. I.1 REP-Na 2 *vs* REP-Na 3 *vs* REP-Na 5.

[Papin et al. 2003] attribue cette décohésion des joints de grains à la montée en pression des bulles (bulles de gaz de fission issues de l'irradiation de base) situées en intergranulaires lors du transitoire RIA : la contrainte générée aux J.d.G par la montée en pression de ces bulles inter-granulaires finissant par dépasser la contrainte à rupture du J.d.G considéré. Cependant ce phénomène ne sem-

∗. Observation fait référence aux observations expérimentales.

blerait pas, à lui seul, expliquer les zones radiales des pastilles UO_2 affectées par la décohésion des J.d.G au sein des différents essais. Notamment il est à constater, au sein de l'essai REP Na 2, que les zones radiales des pastilles UO_2 affectées par décohésion des J.d.G. sont : la périphérie, le « mi-rayon » et le centre pastille. Or et sur la base du REX acquis en REP (crayons ayant subi des micro-analyses après irradiation en fonctionnement normal), les zones périphériques et à mi-rayon des pastilles UO_2 sont quasiment dépourvues de bulles inter-granulaires à ce niveau de taux de combustion : Burn up $= 33\,[GWj].[tM]^{-1}$. Les fractions volumiques des bulles intra-granulaires sont également très faibles dans ces zones radiales des pastilles UO_2 à ce niveau de Burn up. Par conséquent, la décohésion des J.d.G ne semble pas être induite par le seul mécanisme de montée en pression des bulles lors d'un RIA. Selon **[Salvo 2014]** et **[Sercombe 2017]**, lors d'un pulse RIA le combustible UO_2 posséderait a priori un comportement élasto-viscoplastique non linéaire (cf. chapitre II) et il subirait sur une zone radiale de la pastille plus ou moins prononcée (la zone affectée est fonction des caractéristiques du pulse : largeur à mi-hauteur du pulse et niveau d'énergie injectée), sous compression bi-axée (voir éventuellement tri-axée) très élevée ($\bar{\sigma} \sim 900\,[MPa]$ pour les pulses les plus énergétiques - Zone radiale de pastille où la température est élevée, ainsi que le gradient radial de température), une décohésion des joints de grains par endommagement a priori ductile. Ce mécanisme d'endommagement des joints de grains, proposé numériquement par **[Salvo 2014]** et **[Sercombe 2017]** au sein du code ALCYONE et détaillé dans le chapitre 2 (cf. chapitre II), semblerait être un bon paramètre pour quantifier numériquement le relâchement des gaz de fission associé. Néanmoins et en condition de RIA, le ou les mécanismes à l'origine de la décohésion des joints de grains au sein de la pastille UO_2 sont à ce jour assujettis à beaucoup de débat au sein de la communauté internationale du nucléaire. Nous verrons par ailleurs dans le chapitre 2 (cf. chapitre II) que d'autres mécanismes d'endommagement de joints de grains au sein de la pastille UO_2 peuvent être proposés dans la littérature.

Au final et un point sur lequel toute la communauté du nucléaire semble s'accorder c'est l'affirmation suivante : la cinétique du pulse, à savoir la largeur à mi-hauteur du pulse ou en d'autres termes, le temps de dépôt de l'énergie, semble être un paramètre de premier ordre pour caractériser les zones de décohésion des J.d.G au sein des pastilles UO_2 et ce hors de la zone radiale particulière nommée HBS : zone qui n'est présente que pour les crayons UO_2 irradiés à fort taux de combustion (Burn up $> 45 - 50\,[GWj].[tM]$) **[Sercombe 2017]**.

Indépendamment de la cinétique du pulse envisagée, la zone de restructuration HBS subit systématiquement en condition de RIA (cf. Tab. I.1 REP-Na 3, 4, 5, 11) un endommagement prononcé des joints de grains qui conduit à une décohésion de ces derniers.

Au final les analyses expérimentales menées sur les pastilles UO_2 constituant les crayons REP Na 2, 3, 4, 5, 11, après les transitoires de type RIA, peuvent être synthétisées de la façon suivante : pour une cinétique lente du transitoire RIA (largeur à mi-hauteur de l'ordre de $h \gtrsim 30.0\,[ms]$), la zone de décohésion des joints de grain se limitera à la zone de restructuration HBS si celle-ci est présente (crayons irradiés à fort taux de combustion). Pour une cinétique rapide du transitoire RIA (largeur à mi-hauteur de l'ordre de $h \lesssim 10.0\,[ms]$), la zone de décohésion des joints de grains s'étendra vers le centre de la pastille. Cette expansion radiale, plus ou moins prononcée, est à relier au dépôt total d'énergie. Plus ce dépôt sera important, plus la zone de décohésion sera importante. En s'appuyant sur le tableau Tab. I.1, la zone de décohésion de l'essai nommé REP-Na 4 n'est limitée qu'à la zone de restructuration HBS alors que la zone de décohésion de l'essai nommé REP-Na 5 s'étend radialement. La seule différence entre ces deux essais est la largeur à mi-hauteur qui place l'essai nommé REP-Na 4 dans une cinétique lente et l'essai nommé REP-Na 5 dans une cinétique rapide. De plus, la comparaison des essais nommés REP-Na 2-3-5, toujours d'après le tableau Tab. I.1, montre que plus le dépôt d'énergie est important, plus la zone radiale affectée par la décohésion des J.d.G sera importante.

Il est à noter que seul l'essai nommé REP-Na 2 voit ses évidements inter pastilles complètement combler. Ceci est à relier au dépôt d'énergie qui est conséquent pour cet essai.

I.3.2.2 Simulation de l'essai REP-Na 5 lors de l'essai RIA avec le code SCANAIR

Dans le cadre de cette thèse, les essais nommés REP-Na 2-3-4 et 5, ont été simulés via le code de simulation du comportement thermomécanique du crayon combustible en RIA, à savoir SCANAIR [**Moal 2011**] et ce dans l'objectif d'obtenir des chargements macroscopiques à imposer sur les Volumes Élémentaires Représentatifs polycristallins du combustible UO_2. Plus précisément, l'objectif de ces simulations sont de déterminer dans un premier temps et quantitativement les « niveaux » de sollicitations mécaniques (intensités de contraintes, déformations, et vitesses de déformations - triaxialité associée) subies par la pastille UO_2 en condition de RIA et ce afin de pouvoir, à la suite de cette thèse, appliquer ces niveaux de sollicitations mécaniques. Comme le code de simulation du comportement thermomécanique du crayon combustible en RIA ALCYONE* [**Sercombe 2017**], le code SCANAIR [**Moal 2011**] se base sur une loi élastique plastique parfaite† pour modéliser le comportement mécanique de la pastille UO_2 en condition de RIA : il s'agit d'une loi phénoménologique macroscopique qui ne prend pas en compte de manière explicite l'aspect polycristallin poreux du combustible UO_2. Sur la base des résultats obtenus (cf. ci-dessous et Annexe A en complément pour les autres essais RIA simulés), il est impossible à l'heure actuelle d'être sûr de l'état des contraintes obtenues au sein de ces simulations. Celui-ci peut tout aussi bien être surestimé ou sous-estimé à une position radiale et à un temps donné. Même lorsque le modèle de fissuration est activé au sein du code de simulation, les contraintes obtenues, notamment pour l'essai nommé REP-Na 2, semblent trop importantes (localement de l'ordre $\sim 1\,[GPa]$). Le profil de température obtenu lors des simulations numériques via le code de calcul SCANAIR [**Moal 2011**] semble être quant à lui pertinent. A ce jour il n'existe aucun moyen de vérifier par la mesure l'état des déformations et des contraintes au cours de ces essais expérimentaux et plus précisément à une position radiale donnée de la pastille combustible UO_2. Il faut donc être relativement prudent quant à l'utilisation des états de contraintes et déformations obtenus lors des simulations numériques exposées ici. Néanmoins, le code de simulation peut fournir de manière qualitative l'état des contraintes dans lequel se trouve la pastille combustible (parle-t-on de quelques Pascals, quelques méga Pascals, quelques giga Pascals ?...) à un instant donné du pulse. Cette idée, même entachée d'erreurs, pourrait s'avérer suffisante afin d'obtenir un niveau de chargement effectif du bon ordre de grandeur.

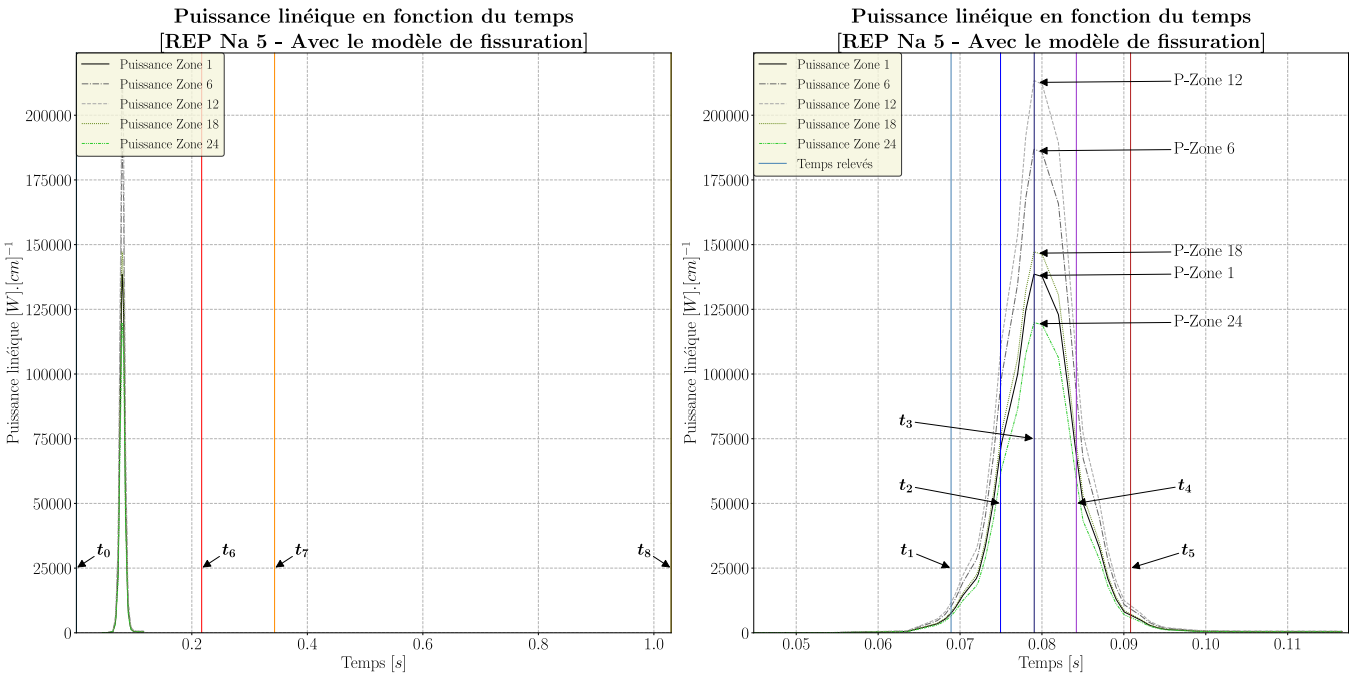
Seules les simulations de l'essai nommé REP-Na 5 issues du code de calcul numérique SCANAIR [**Moal 2011**] sont présentées ci-après (les résultats des autres essais sont exposés Annexe A). Le modèle de fissuration de la pastille est activé au sein de la pastille UO_2, ainsi que la loi élastoplastique parfaite : la référence [**Moal 2011**] contient de plus amples informations sur les formalismes de ces modèles et les paramètres associés.

Le crayon combustible subissant le transitoire est discrétisé axialement en 24 tranches : zones 1 à 24. La zone 1 correspond donc au bas du crayon combustible, là où le réfrigérant a sa température minimale. La zone 24 correspond au haut du crayon combustible, là où le réfrigérant a sa température maximale. Le profil axial de puissance n'est pas homogène dans le crayon combustible comme cela est illustré par les figures Fig. I.7-(a)-(b). Ceci provient des effets de bords et notamment d'un échange de température plus important en haut et bas du crayon que dans la zone centrale. C'est autour de cette dernière zone que le profil de puissance est maximal. Ce sera donc autour de cette zone que les sollicitations mécaniques seront les plus importantes pour le crayon combustible UO_2 et de surcroît pour les pastilles UO_2.

En se basant sur le tableau Tab. I.1 et plus particulièrement la colonne REP-Na 5, il est à remarquer que la quasi totalité de l'énergie injectée se fait en un temps relativement court $t = 0.096\,[s]$. La largeur à mi-hauteur est du bon ordre de grandeur dans la simulation (Fig. I.7-(b)).

∗. Le code de simulation numérique ALCYONE se base sur la loi de comportement (L3F) issue des travaux de [**Salvo 2014**] et présentée dans la note suivante : [**Sercombe 2017**]. Cette loi de comportement est explicitée dans la suite du document. Si le lecteur souhaite s'y référer : voir II.1.4 loi phénoménologique « L3F » issue de [**Salvo 2014**].

†. Pour la condition accidentelle de type RIA, le code de calcul numérique SCANAIR [**Moal 2011**] se base sur la loi issue des travaux de [**Canon et al. 1971**]. C'est une loi puissance « abusivement » nommée élastique plastique



(a) Vue globale de l'évolution de la puissance en fonction du temps.

(b) Agrandissement de la zone du pulse de puissance.

FIGURE I.7 – Essai RIA REP-Na 5 : Graphiques représentant la puissance en fonction du temps et ce pour différentes zones axiales du crayon combustible étudiés - Simulations SCANAIR.

Différents temps ont été pris afin d'étudier l'évolution de certains paramètres (température, contraintes, déformations) au cours du temps. Le temps t_0 ne correspond pas tout à fait à l'instant initial. En effet, afin de pouvoir obtenir les fissures issues du fonctionnement de base de la pastille combustible UO_2, il est appliqué un chargement important à cet instant lors de la simulation. Le temps t_1 est défini tel que $P_{t_1} = \frac{5}{100} P_{max}$[†] lorsque la puissance augmente. Le temps t_2 est défini tel que $P_{t_2} = \frac{50}{100} P_{max}$ lorsque la puissance augmente. Le temps t_3 est défini tel que $P_{t_3} \sim P_{max}$. Les temps t_4 et t_5 sont définis respectivement comme les temps t_2 et t_1 mais lorsque la puissance diminue. Le temps t_6 est défini comme la moyenne des temps t_5 et t_7[‡]. Le temps t_7 est quant-à lui défini tel que $P_{t_7} = \frac{1}{1000} P_{max}$. Finalement le temps t_8 est défini tel que $t_8 = 3 \times t_7$.

Le profil de température dépend fortement du temps d'intérêt comme illustré par la figure Fig. I.8-(a). La température augmente de manière adiabatique avec un pic de température qui se forme proche de la périphérie de la pastille combustible UO_2. Ce pic finit par se décaler et se propager radialement vers le centre de la pastille combustible à mesure que le temps augmente. Il est à noter que la température maximale, et ce pour un pic marqué, est obtenue pour le temps t_5 c'est à dire vers la fin du pulse (voir Fig. I.7-(b)). En reprenant les différents temps définis précédemment, la température est initialement à la température du caloporteur. Lorsque le temps augmente la température retrouve un profil parabolique inversé typique du fonctionnement normal.

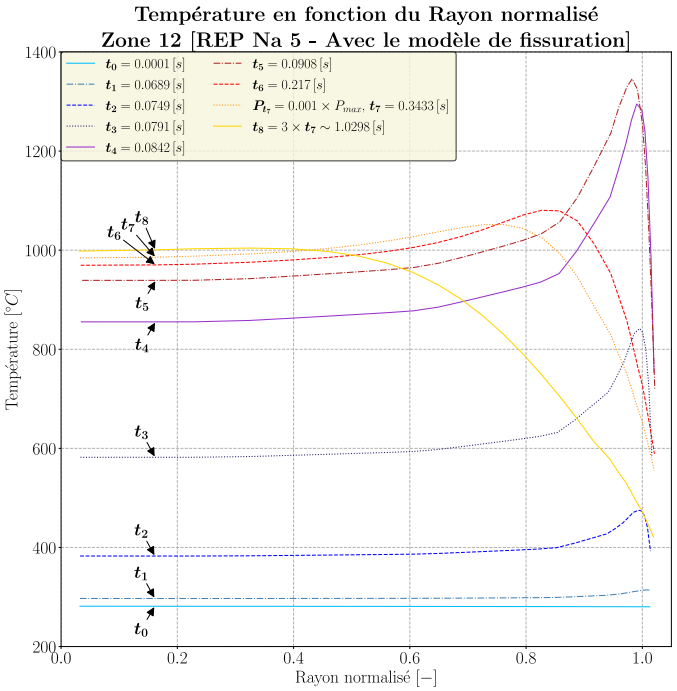
Étant donné que le modèle de fissuration est activé, seules les parties en compression seront visibles sur les graphiques représentant respectivement les contraintes radiales ($\bar{\sigma}_R$ Fig. I.8-(b)), les contraintes circonférentielles ($\bar{\sigma}_{\theta\theta}$ Fig. I.9-(b)) et les contraintes axiales ($\bar{\sigma}_Z$ Fig. I.9-(a)).

Pour ce qui est des contraintes radiales (Fig. I.8-(b)), celles-ci sont maximales pour le temps t_4.

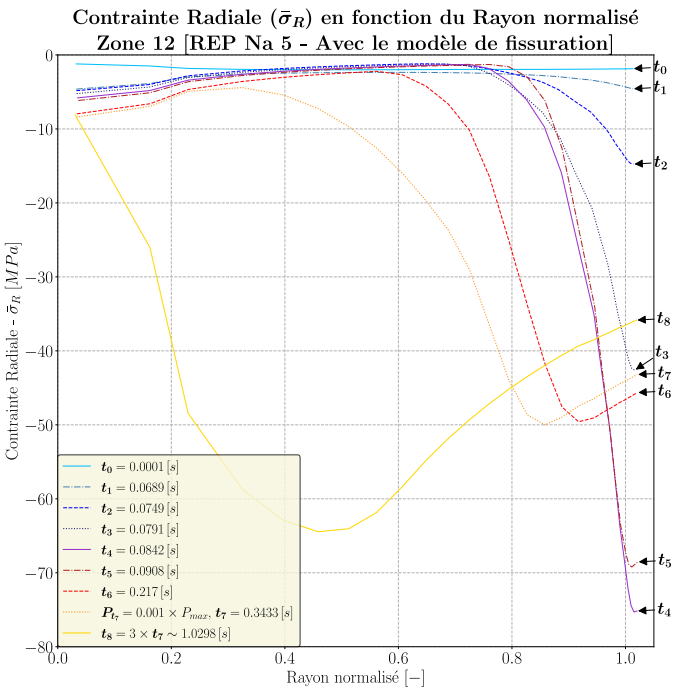
parfaite car elle a un exposant de la loi puissance de l'ordre de $n = 4.23$, coefficient qui est relativement élevé.

†. Les temps sont définis pour la zone axiale considérée. Le terme P_{max} renvoie à la puissance linéique maximale atteinte sur la zone axiale considérée. Il est à remarquer sur Fig. I.7 que la puissance maximale sur chacune des zones axiales est atteint au même instant.

‡. Le temps t_6 est donc bien inférieur au temps t_7 : $t_6 < t_7$.

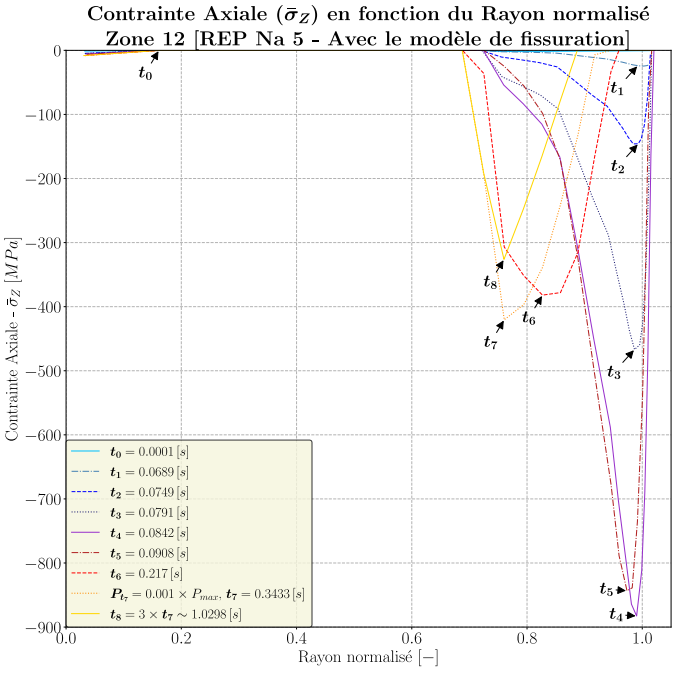


(a) Profil de température à différents temps.

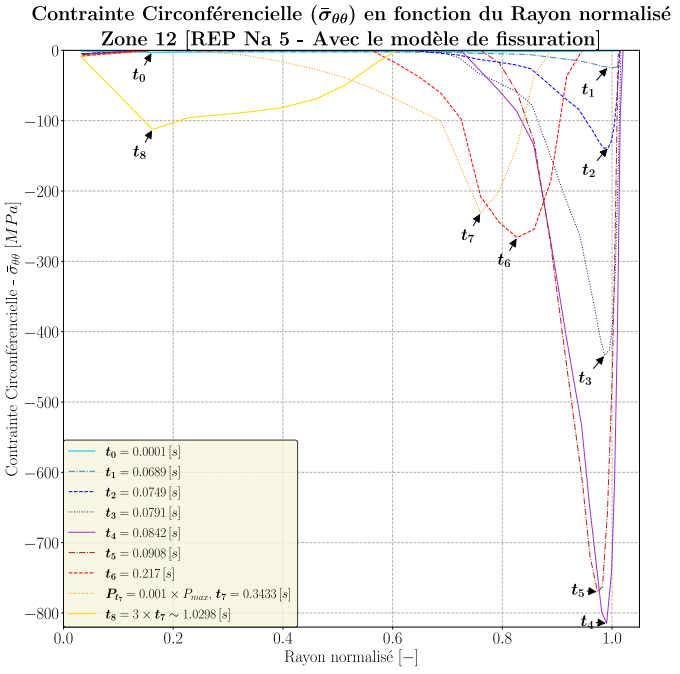


(b) Contrainte radiale $\bar{\sigma}_R$.

FIGURE I.8 – Essai RIA REP-Na 5 : Graphiques représentant la température et la contrainte radiale en fonction du rayon normalisé de la pastille UO_2 pour la zone axiale centrale du crayon (Zone 12) et ce à plusieurs temps - Simulations SCANAIR.



(a) Contrainte axiale $\bar{\sigma}_Z$.



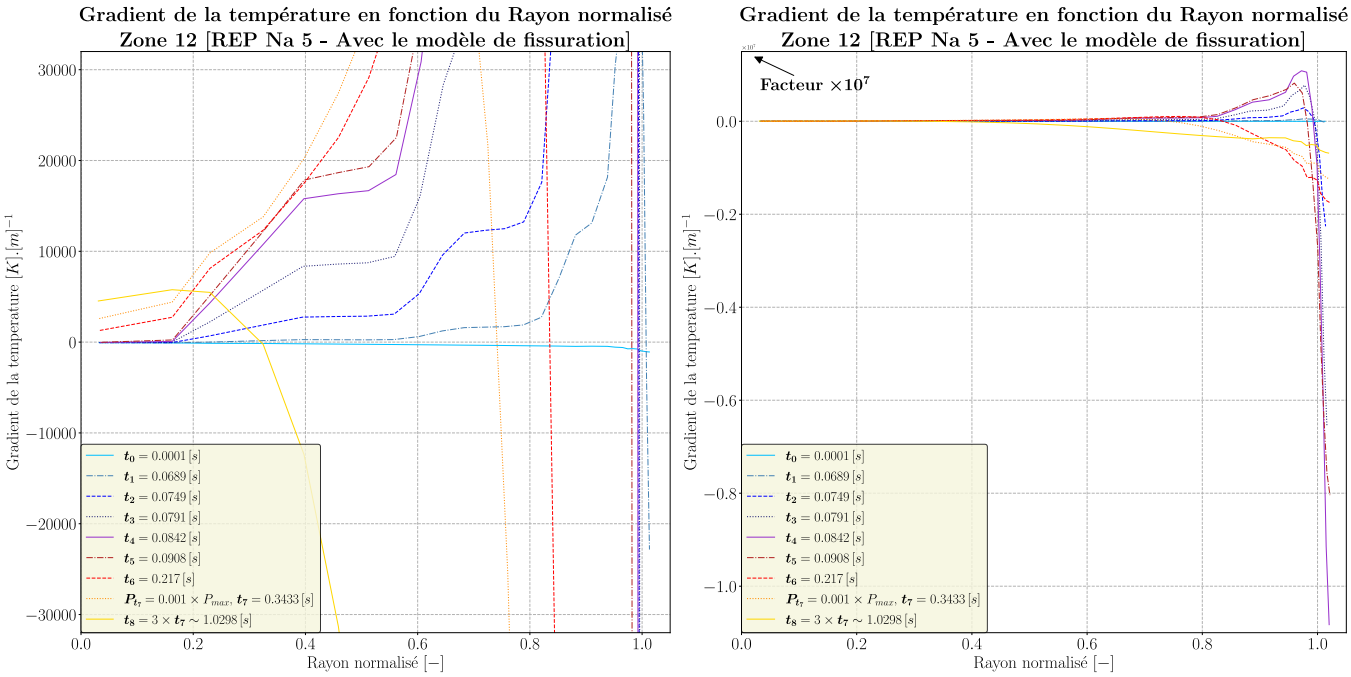
(b) Contrainte circonférentielle $\bar{\sigma}_{\theta\theta}$.

FIGURE I.9 – Essai RIA REP-Na 5 : Graphiques représentant les contraintes axiale et circonférentielle en fonction du rayon normalisé de la pastille UO_2 pour la zone axiale centrale du crayon (Zone 12) et ce à plusieurs temps - Simulations SCANAIR.

La contrainte radiale est bornée avec ce modèle de fissuration à $\bar{\sigma}_R \in [-80.0, 0.0]\,[MPa]$. Pour ce qui est des contraintes axiales et circonférentielles, les profils de contraintes sont plus complexes. Les maximums sont toujours atteints pour un temps t_4. Par contre les bornes de ces contraintes sont beaucoup plus élevées. Il y a en effet un facteur 10 avec les contraintes radiales. Les valeurs

numériques sont particulièrement élevées et avoisines le Giga Pascal. Même hors du pic de contraintes, ces dernières restent localement élevées.

Le champ de contrainte régnant dans la pastille combustible est à minima un champ de contrainte bi-axé voire éventuellement tri-axé. Il est à rappeler que la simulation effectuée est faite avec le modèle de fissuration. Sans ce dernier les contraintes sont bien plus élevées.



(a) Gradient de température.

(b) Agrandissement du gradient de température.

FIGURE I.10 – Essai RIA REP-Na 5 : Graphiques représentant le gradient de température en fonction du rayon normalisé de la pastille UO_2 pour la zone axiale centrale du crayon (Zone 12) et ce à plusieurs temps - Simulations SCANAIR.

Le gradient de la température a été tracé figure Fig. I.10. Il est à noter qu'il y a un coefficient $\times 10^7$ en haut à gauche de la figure. L'échelle des ordonnées est donc à multiplier par ce coefficient.

Le gradient thermique atteint des valeurs numériques très importantes notamment à l'extrême périphérie. Ceci peut s'expliquer par le pic de température (voir figure Fig. I.8-(a)). L'intervalle de température est en effet très important à ce niveau et ce pour une distance relativement faible.

I.4 Synthèse Chapitre I

En résumé et au sein d'un REP, il existe actuellement trois barrières de sécurité que sont l'enceinte interne du bâtiment réacteur, le circuit primaire du réacteur et la gaine du crayon combustible. Le travail de thèse portera sur cette dernière barrière de protection et plus particulièrement sur le comportement mécanique de la pastille combustible UO_2 lors d'un accident d'insertion de réactivité (RIA).

L'insertion de réactivité se traduit à l'échelle du coeur par la rupture et l'éjection locale, par différence de pression, d'une grappe de barres de contrôles. Cela entraîne un chargement particulièrement conséquent sur le crayon combustible portant le point chaud et sur les pastilles UO_2 composant ce crayon et notamment celles situées axialement au Plan de Flux Maximal (PFM). En effet ces dernières peuvent subir des températures de l'ordre de $T \sim 500\,[°C]$ à $T \sim 2500\,[°C]$ localement. Elles subissent également une vitesse de déformation de l'ordre de $\dot{\bar{\varepsilon}} \in [10^{-1}, 10]\,[s]^{-1}$. Les conséquences de cet accident d'insertion de réactivité (et donc son chargement sur les pastilles UO_2) dépendent fortement de l'instant pour lequel survient l'accident, de l'état micro structural de la pastille UO_2 à cet instant, et des caractéristiques du pulse de puissance subies.

L'état micro structural est conditionné et dépend lui même de nombreux paramètres comme la zone radiale d'intérêt, la zone axiale d'intérêt, le taux de combustion avant accident, l'état de fabrication, etc. Cet état est très complexe et multifactoriel. Les paramètres intervenant peuvent interagir également entre eux. Au cours de cet accident de type RIA, l'énergie déposée au sein du combustible UO_2 induit des sollicitations thermomécaniques pouvant conduire à un endommagement des joints de grains au sein du polycristal UO_2 et ce sur une zone radiale de la pastille plus ou moins conséquente. Non seulement, cet endommagement peut conduire à une sur-fragmentation locale du combustible avec des fragments de différentes dimensions, mais il peut également induire le relâchement des gaz de fission qui étaient piégés aux joints de grains au sein du polycristal UO_2 sous différentes formes : gaz dissous, gaz au sein des bulles pressurisées ou gaz au sein des pores de fabrication. Ce relâchement de gaz, au sein des volumes libres du crayon combustible UO_2, peut par voie de conséquence induire une augmentation locale de pression interne dans le crayon et donc générer une sollicitation supplémentaire sur la gaine. Cette sollicitation supplémentaire peut éventuellement amplifier un phénomène de ballonnement de la gaine en cas de crise d'ébullition du caloporteur. De plus et en cas de rupture de la gaine (rupture par IPG_{m} ou par ballonnement éclatement), les fragments de petites dimensions pourraient éventuellement être pulvérisés hors de la gaine.

Chapitre II

Bibliographie des essais mécaniques macroscopiques et microscopiques, hors irradiation, réalisés sur le combustible (pastille ou monocristaux) de dioxyde d'uranium, de quelques lois de comportement phénoménologiques et des approches en champ complet développées (approche polycristalline) pour modéliser ces essais ainsi que du modèle d'ordre réduit NTFA

II.1 Essais expérimentaux macroscopiques et loi phénoménologique « L3F »

Le comportement de la pastille combustible est multi factorielles de par ses caractéristiques. Comme mentionné dans le chapitre I, les différents paramètres pouvant jouer un rôle et avoir un impact sur le comportement du matériau sont : la position radiale, la position axiale, les porosités et leurs caractéristiques (Tailles - Positions (Intra - Inter granulaire) - Formes), la densité à relier à la porosité, la vitesse de déformation, le taux de combustion, la puissance à relier aux positions axiales et radiales, la température qui est à relier à la puissance, la déviation à la stoechiométrie, les produits de fissions (migrations et interactions) et enfin la taille des grains. Il existe peu d'essais expérimentaux dans la littérature. Ces derniers sont relativement peu récents du fait du coût important des essais. Au-delà de constater le faible nombre d'essais, notamment sur les vingts dernières années, il est difficile de recouper les différents articles. Il est difficile de trancher lorsqu'il y a des contradictions. Les articles manquent parfois de description vis-à-vis de certains paramètres, certains paramètres sont même absents de certaines publications ce qui ne facilite pas l'interprétation des résultats et amène des zones d'ombres.

Il y a très peu de publications récentes sur les essais expérimentaux alors que les techniques d'observations sont nettement meilleures que dans le passé.

Dans un premier temps une revue bibliographie sur les essais macroscopiques est effectuée. Celle-

ci permettra d'éclairer et d'avoir un avis vis-à-vis de l'approche phénoménologique et de la loi « L3F » développée dans les travaux de thèse de [**Salvo 2014**] : ces travaux étant en lien étroit avec ce sujet de thèse.

Avant de rentrer dans le vif du sujet, il est apparu important d'introduire certains mécanismes viscoplastiques induisant des déformations irréversibles. En plus des mécanismes une petite section est dédiée à la rupture du matériau. Ces deux introductions seront explicitées plus en détails dans la suite du document.

II.1.1 Mécanismes : Visco-plasticité - Rupture

Le tenseur des déformations totales, défini Eq. I.1, se décompose comme une somme de tenseurs de déformations. Parmi ces tenseurs, deux termes portent la déformation viscoplastique : $\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathsf{th}}_{\mathsf{vp}}$, le tenseur des déformations viscoplatiques hors irradiation et $\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathsf{vp}}_{\mathsf{irr}}$, le tenseur des déformations viscoplastiques induites par les pointes de fission nucléaire (fluage induit par l'irradiation).

Pour ce qui est du premier terme ($\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathsf{th}}_{\mathsf{vp}}$), celui-ci n'est actif qu'en conditions accidentelle et incidentelle contrairement au terme de fluage d'irradiation qui lui est plus ou moins dominant suivant les conditions de fonctionnement. En d'autres termes, la pastille UO_2 est considérée élastique fragile jusqu'à une certaine température et ce bien que le fluage d'irradiation engendre une déformation viscoplastique, c'est-à-dire une déformation irréversible, dans ce domaine. Au delà de cette température (température de transition qui est explicitée plus tard dans ce chapitre), la pastille UO_2 est considérée élasto-viscoplastique, le terme $\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathsf{th}}_{\mathsf{vp}}$ portant la déformation viscoplastique (hors fluage d'irradiation) est actif dans ce domaine et induira des déformations irréversible au même titre que le fluage d'irradiation. Il est à noter que le tenseur des déformations viscoplastiques induites par les pointes de fission nucléaire ($\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathsf{vp}}_{\mathsf{irr}}$) devient progressivement négligeable ou est totalement négligeable (cas du RIA) par rapport au tenseur des déformations viscoplatiques ($\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathsf{th}}_{\mathsf{vp}}$) au delà d'une certaine température de transition qui est explicitée plus tard dans ce chapitre.

Les essais abordés dans la suite du document ne comportent pas le terme de fluage d'irradiation. Seul le terme $\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathsf{th}}_{\mathsf{vp}}$, tenseur des déformations viscoplastiques, est détaillé. La déformation viscoplastique induit une déformation irréversible et est traduite à l'échelle microscopique par le mouvement des défauts. Ce terme ($\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathsf{th}}_{\mathsf{vp}}$) peut être induit par différents mécanismes comme la diffusion de lacunes, le glissement des dislocations, le couplage de ces derniers (couplage diffusion et glissement des dislocations) et le glissement des joints de grains.

Les auteurs, abordés dans la littérature et analysés dans ce document, associent généralement un mécanisme à certains paramètres de la loi de Norton (cf. Eq. II.1), paramètres comme l'énergie d'activation (Q), l'exposant de dépendance à la taille de grain (q) et ou l'exposant de dépendance à la contrainte (n) lorsque cela est possible. Il est à noter que plus l'exposant n est important, plus le comportement tend vers un comportement plastique parfait. Pour un exposant $n >> 5$, la loi de Norton (cf. Eq. II.1) n'est plus adéquate pour relier la vitesse de déformation viscoplastique à la contrainte. La littérature n'est pas claire vis-à-vis du ou des mécanismes induisant la déformation irréversible dans ce domaine. Néanmoins il semblerait que la déformation irréversible soit induite, et ce de manière non négligeable, par le mécanisme de glissement des lignes de dislocations (explicité plus en détails dans la suite).

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathsf{th}}_{\mathsf{vp}}(\boldsymbol{x},t) \propto A_0 \times \frac{d}{d_0}^{q} \times exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) \times \frac{\boldsymbol{\sigma}}{\sigma_0}^{n}(\boldsymbol{x},t)$$

Avec :

$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathsf{th}}_{\mathsf{vp}}$	Tenseur des vitesses de déformations viscoplastiques.	$[-]$
$\boldsymbol{\sigma}$	Le tenseur des contraintes.	$[MPa]$
n	Exposant traduisant la dépendance de la loi à la contrainte.	$[-]$
d	Taille du grain à la position $\boldsymbol{x}$ considérée.	$[m]$
q	Exposant traduisant la dépendance de la loi à la taille de grain.	$[-]$
Q	Barrière d'énergie à franchir pour déformer viscoplastiquement.	$[kJ].[mol]^{-1}$
R	Constante des gaz pafaits.	$[kJ].[mol]^{-1}.[K]^{-1}$
T	La température.	$[K]$
A_0	Constante dépendant de la micro-structure.	$[s]^{-1}$
σ_0	Contrainte seuil	$[MPa]$
d_0	Taille de grain prise comme référence	$[m]$

(II.1)

La loi d'Arrhenius (cf. Eq. II.2) est également utilisée par certains des auteurs.

$$\nu \propto \nu_0 \times exp\left(-\frac{\Delta G}{k_{\mathsf{b}} T}\right)$$

Avec :

ν	Vitesse de changement d'état.	$[s]^{-1}$
ν_0	Vitesse de de référence de l'état considéré.	$[s]^{-1}$
$exp\left(-\frac{\Delta G}{k_{\mathsf{b}} T}\right)$	Probabilité de changement d'état.	$[-]$
ΔG	Variation d'énergie entre les deux états.	$[J]$
k_{b}	Constante de Boltzmann.	$[J].[K]^{-1}$
T	La température.	$[K]$

(II.2)

II.1.1.1 Visco-plasticité induite par la diffusion de lacunes

Le mécanisme de diffusion regroupe deux mécanismes. Ce mécanisme est traduit à l'échelle microscopique par le mouvement des lacunes dans le monocristal ou au niveau des joints de grains. Ces deux mécanismes (diffusion intra ou inter-granulaire) diffèrent par leur dépendance de la vitesse de déformation à la taille de grains ainsi que par l'énergie d'activation (cf. Eq. II.1).

II.1.1.1.1 Viscoplasticité induite par la diffusion de lacunes via la structure cristallographique

La diffusion de lacunes à travers la structure cristallographique (diffusion intra-granulaire) engendre des déformations irréversibles. Ce mécanisme de diffusion intra-granulaire est appelé diffusion de type Nabarro-Herring [**Nabarro 1948 ; Herring 1950**]. Ce type de diffusion se caractérise via la loi puissance (cf. Eq. II.1) par le fait que la vitesse de déformation dépend linéairement de la contrainte ($n = 1$ Eq. II.1) et est inversement proportionnel à la taille de grains élevée au carré ($q = -2$ Eq. II.1).

II.1.1.1.2 Viscoplasticité induite par la diffusion de lacunes via les joints de grains

La diffusion de lacunes au niveau des joints de grains (diffusion inter-granulaire) engendre également des déformations irréversibles. Ce mécanisme de diffusion inter-granulaire est appelé diffusion

de type Coble [**Coble 1963**]. Ce type de diffusion se caractérise via la loi puissance (cf. Eq. II.1) par le fait que la vitesse de déformation dépend linéairement de la contrainte ($n = 1$ Eq. II.1) et est inversement proportionnel à la taille de grains élevée au cube ($q = -3$ Eq. II.1).

II.1.1.2 Visco-plasticité induite par le glissement de dislocations

Outre les deux premiers mécanismes de diffusion (intra et inter-granulaire), le mécanisme de mouvement des lignes de dislocations est également mis en avant par les auteurs. Ce mécanisme se caractérise via la loi puissance (cf. Eq. II.1) par le fait que la vitesse de déformation est proportionnelle à la contrainte élevée à la puissance 4-5 ($n = 4-5$ Eq. II.1). Ce mécanisme, induisant des déformations irréversibles, peut être provoqué par plusieurs phénomènes comme par exemples : le glissement dévié, le glissement des lignes de dislocations franchissant la barrière de Peierls [**Peierls 1940**] (et plus particulièrement le franchissement par double décrochement [**Seeger 1956**]), l'interaction des lignes de dislocations avec les impuretés anioniques ou défauts existant dans la structure, ainsi que des phénomènes plus complexes : la création, annihilation, épinglages, etc.

Au delà de la dépendance de la vitesse de déformation à la contrainte ($n = 4-5$), cette première dépend également de la taille de grain élevée au carré ($q = 2$ Eq. II.1). Ce phénomène, appelé effet Hall-Petch [**E. Hall 1951 ; Petch 1953**] traduit le rôle des joints de grains à agir comme des barrières ou des obstacles aux glissements des lignes de dislocations. Cet effet engendre un durcissement.

II.1.1.3 Couplage entre ces deux mécanismes

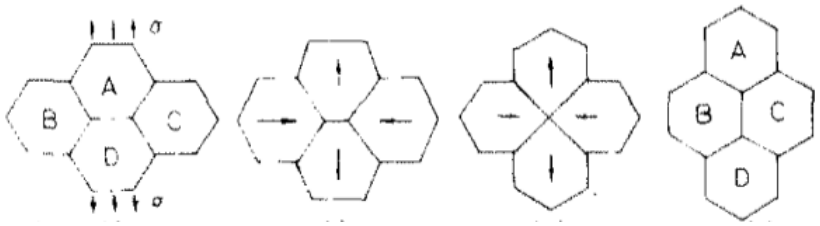
Pour une température suffisamment élevée, le phénomène de montée de dislocations est mis en avant par certains auteurs (la valeur de cette température n'est pas explicitée par les auteurs, néanmoins plus la température est importante plus ce phénomène semble prendre de l'importance). Ce phénomène, induisant des déformations irréversibles, est un mécanisme de glissement de dislocations assisté par de la diffusion des lacunes. Le mécanisme de diffusion peut tout aussi bien être du type Nabarro [**Nabarro 1948**] Herring [**Herring 1950**] ou de type Coble [**Coble 1963**]. Ce phénomène contrebalance l'effet Hall-Petch [**E. Hall 1951 ; Petch 1953**] cité précédemment. Il permet notamment de re-mobiliser des lignes de dislocations bloquées par des obstacles (Joints de Grains, impuretés, etc.). Ce mécanisme de montée de dislocations se caractérise via la loi puissance par une dépendance de la vitesse de déformation à la contrainte ($n = 4-5$ Eq. II.1). Ce mécanisme ne dépend pas de la taille de grains.

II.1.1.4 Visco-plasticité induite par le glissement des joints de grains

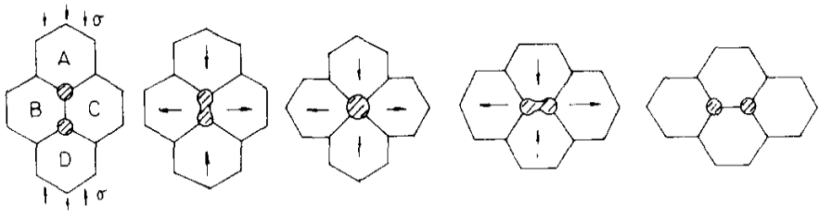
Enfin, le dernier mécanisme, retenu et cité par les différents auteurs, est le mécanisme de glissement aux joints de grains mis en avant par [**Ashby et Verrall 1973**] et repris par [**Chung et Davies 1979a**]. Ce dernier est illustré Fig. II.1. Il se traduit à l'échelle des monocristaux par du glissement entre les grains. Selon certains auteurs, ce mécanisme est d'autant plus important que la taille de grains est faible.

Afin de maintenir l'intégrité du polycristal, ce mécanisme de glissement aux joints de grains, induisant de la déformation irréversible, doit être assisté par un mécanisme tiers de type diffusion ou de type glissement des lignes de dislocations. [**Ashby et Verrall 1973**] ne détaillent le modèle que lorsqu'il est supporté par un mécanisme de diffusion (préférentiellement de type Coble [**Coble 1963**]). Néanmoins ces derniers précisent que ce mécanisme pourrait avoir lieu dans le domaine des fortes contraintes et être accommodé par un mécanisme de glissements des lignes de dislocations.

Il est à remarquer que la vitesse de déformation n'est pas la même si le mécanisme viscoplastique, qui induit de la déformation irréversible, est un mécanisme de glissement au joints de grains assisté par de la diffusion ou un mécanisme de diffusion seul. En d'autres termes, la vitesse de déformation est supérieure d'un facteur 10 pour le mécanisme de glissement aux joints de grains assisté par de la diffusion comparativement au mécanisme de diffusion seul [**Ashby et Verrall 1973**].



(a) Illustration du mécanisme de glissement aux joints de grains.



(b) Illustration du mécanisme de glissement aux joints de grains avec porosité.

FIGURE II.1 – Illustration du mécanisme de glissement aux joints de grains en traction et compression. Ces derniers sont supportés par un mécanisme de diffusion. (a)- [**Ashby et Verrall 1973**] - (b)- [**Chung et Davies 1979a**] inspiré de (a).

Ce mécanisme de glissement aux joints de grains est relativement difficile à observer. Il se caractérise par un changement topologique de la structure cristalline comme illustré Fig. II.1. En d'autres termes, les grains ne sont pas entourés par les même voisins et le nombre de voisins peut également changer entre le début et la fin de l'essai expérimental. Pour compléter, la déformation irréversible est induite par un réarrangement des grains entre eux dans la structure polycristalline. Ce mécanisme n'induit pas de changement de formes des grains (allongement dans une direction, etc.). Ce dernier point signifie que lorsqu'un changement de la forme des grains est observé, le mécanisme de glissement aux joints de grains ne peut être qu'un mécanisme tout au plus accommodant d'autres mécanismes précédemment cités. La déformation irréversible est alors induite par un des autres mécanismes.

Il est à noter que les mécanismes peuvent cohabiter. De plus et afin de maintenir l'intégrité du polycristal (continuité des joints de grains notamment), les mécanismes peuvent s'accommoder entre eux.

II.1.1.5 Rupture élasto-fragile

Lorsque le comportement est élasto-fragile, les auteurs s'accordent sur le fait que la rupture est initiée par le plus gros des défauts existant dans la structure. [**Tachibana et al. 1979**], entre autres, utilisent l'équation de Griffith [**Griffith et Taylor 1921**] pour obtenir la contrainte à rupture du matériau, contrainte à rupture qui dépend de la taille de la porosité la plus grande. Cet auteur obtient de très bons résultats. La fissure, initiée à partir de la porosité la plus grande, se propage majoritairement de manière transgranulaire dans ce domaine.

II.1.1.6 Rupture ductile

Dans le domaine ductile la déformation viscoplastique, induisant des déformations irréversibles, peut s'accompagner à partir d'un certain niveau de déformation viscoplastique d'un endommagement de la structure [**Tottle 1965 ; Canon et al. 1971**]. Cet endommagement finit par créer des micro fissures aboutissants à des fissures méso ou macroscopiques. Ces fissures se propagent majoritairement de manière intergranulaire. Les auteurs observent, dans ce domaine, deux faciès de rupture différents. D'un côté, les auteurs observent des porosités sphériques sur les faciès de rupture signe que l'échantillon s'est endommagé par nucléation, croissance, coalescence de cavités [**Chung et Davies 1979a ; Reynolds et al. 1975 ; Dherbey et al. 2002**]. Ce type d'endommagement est généralement attribué à de la diffusion. D'un autre côté les auteurs observent des porosités anguleuses [**Reynolds et al.**

1975 ; Dherbey et al. 2002] sur les faciès de rupture signe que l'endommagement est différent. Le phénomène et mécanisme à l'origine de cet endommagement n'est pas clairement identifié.

II.1.2 Essais à l'échelle macroscopique sur combustible vierge, hors RIA

II.1.2.1 Essais de compression uniaxée à l'échelle macroscopique

II.1.2.1.1 Références analysées

Afin d'étudier le comportement du dioxyde d'uranium UO_2 sur des essais de compression, les articles de [**Byron 1968b**], [**Nadeau 1969**], [**Bohaboy et al. 1969**], [**Seltzer et al. 1972a**], [**Burton et Reynolds 1973**], [**Burton et al. 1973**], [**Igata et Domoto 1973**], [**Burton et Barnes 1975**], [**Guerin 1975**], [**Reynolds et al. 1975**], [**Radford et Terwilliger 1975**], [**Tachibana et al. 1976**], [**Tachibana et al. 1979**], [**Chung et Davies 1979a**], [**Mohamed et Soliman 1982**], [**Solomon et al. 1982**], [**Slagle 1984**], [**Gridnev et al. 1985**], [**Knorr et al. 1989**], [**Dherbey et al. 2002**], [**Sauter et Leclercq 2003**], [**Salvo 2014**] et [**Ben Saada 2017**] ont été étudiés (essais de compression uniaxée). Afin d'illustrer le propos tenu, certaines illustrations issues des résultats expérimentaux ou des schémas des différents auteurs sont reprises des différents articles mentionnés.

L'analyse du comportement sur des essais de compression est subdivisée est subdivisée, à la manière de [**Mohamed et Soliman 1982**], en trois sous-domaines qui sont le domaine des faibles contraintes, le domaine des contraintes intermédiaires et le domaine des fortes contraintes. Cette subdivision est utilisée pour permettre une analyse des mécanismes induisant la déformation viscoplastique dans ces domaines et ainsi pouvoir relier la vitesse de déformation à la contrainte par une loi de type puissance (Eq. II.1). [**Dherbey et al. 2002**] propose dans ses travaux une loi en sinus hyperbolique sur l'ensemble du domaine d'étude contrairement à certains auteurs qui attribuent une loi par domaine. Il est à noter que la plupart des auteurs ne distinguent que deux domaines de contraintes, le domaine des faibles contraintes et le domaine des fortes contraintes. Ce dernier domaine regroupe en général le domaine intermédiaire de contraintes et le domaine des fortes contraintes de [**Mohamed et Soliman 1982**].

Le mécanisme induisant la déformation irréversible est directement lié à la température, la contrainte, la porosité (densité, forme, distribution) et à la taille de grains ([**Bohaboy et al. 1969**]). Le domaine d'étude est dès lors subdivisé en sous-domaines pour permettre l'identification du ou des mécanismes activé(s) dans ce sous-domaine . Il est à noter que certains paramètres (porosité, taille de grains ...) ou conditions de sollicitations (niveau de vitesse de déformation imposée), peuvent également influer sur les températures et contraintes de transitions délimitant les « frontières » entre ces sous-domaines.

Le domaine thermiquement activé sera étudié sur trois domaines de contraintes en utilisant la contrainte normalisée énoncée par [**Mohamed et Soliman 1982**]. Celle-ci est définie par l'équation suivante Eq. II.3.

$\frac{\sigma}{G}$ La contrainte normalisée

$$G = G_0 - \Delta G \times T$$

Avec :

G	Le module de cisaillement élastique.	$[MPa]$
$G_0 \sim 6.52 \times 10^4$	Le module de cisaillement élastique extrapolé à température nulle.	$[MPa]$
$\Delta G \sim 2.26$	La variation du module de cisaillement. élastique	$[MPa].[K]^{-1}$
T	La température.	$[K]$
	Valeurs numériques d'après [**Sung et Turbaugh 1967**].	

(II.3)

Cette contrainte normalisée permet d'identifier trois domaines, domaine des fortes contraintes avec $10^{-3} < \frac{\sigma}{G}$, domaine des contraintes intermédiaires avec $5 \times 10^{-4} < \frac{\sigma}{G} < 10^{-3}$ et domaine des faibles contraintes avec $\frac{\sigma}{G} < 5 \times 10^{-4}$. Cette contrainte normalisée fait dépendre les contraintes de transitions à la température, néanmoins ces dernières varient relativement peu lorsque la température évolue*. Comme les auteurs se ramènent souvent à un domaine de contrainte, la subdivision se fera avec la contrainte non normalisée. Les domaines deviennent : domaine des fortes contraintes avec $61 < \sigma\,[MPa]$, domaine des contraintes intermédiaires avec $30.5 < \sigma < 61\,[MPa]$ et domaine des faibles contraintes avec $\sigma < 30.5\,[MPa]$.

II.1.2.1.2 Synthèse du comportement du combustible UO_2 en compression

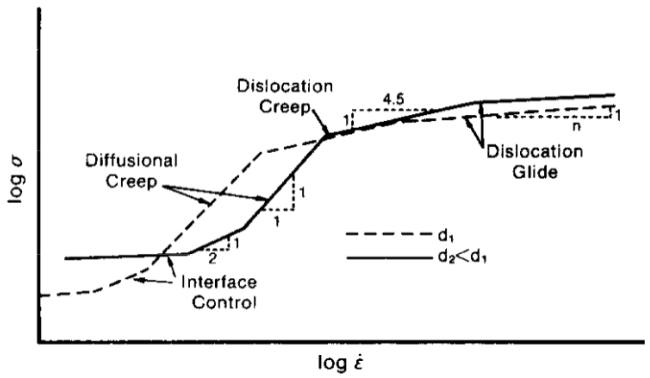


FIGURE II.2 – Représentation schématique des domaines et des exposants de la contrainte (cf. Eq. II.1) associés aux différents mécanismes induisant les déformations viscoplastiques [**Knorr et al. 1989**] avec (d_1, d_2) taille de grain et $n = 1, 2, 4.5$ exposant à la contrainte.

Comme illustré figure Fig. II.2 et sur la base des différents essais réalisés par les auteurs cités dans la référence [**Knorr et al. 1989**], il semblerait, dans le domaine des basses contraintes, que le mécanisme induisant la déformation viscoplastique soit un mécanisme d'interface associé à un exposant $n \sim 2$. Ce mécanisme laisse progressivement la place à un mécanisme de diffusion de type majoritairement Coble. C'est-à-dire une diffusion à travers les joints de grains. L'exposant de la loi puissance associé est $n \sim 1$ proche de l'unité. La vitesse de déformation est alors inversement proportionnelle à la taille de grain élevée au cube (diffusion type Coble). Dans le domaine intermédiaire, la déformation viscoplastique semblerait être générée par le mouvement des dislocations associé à un exposant $n \sim 4-5$. Les auteurs ne sont pas unanimes. Certains envisagent que le mécanisme soit la montée de dislocations, d'autres envisagent un glissement contrôlé par le franchissement par double décrochement de la barrière de Peierls. Dans le domaine des hautes contraintes la déformation est induite par un mécanisme qui n'est pas bien identifié. Le comportement est plastique parfait avec un exposant associé $n >> 5$. La loi puissance n'est pas pertinente pour modéliser ce comportement. Certains auteurs avancent dans ce domaine un changement dans la façon de diffuser. Les lignes de dislocations peuvent permettre aux pores d'agir en tant que sources et puits de lacunes. Elles peuvent également permettre la diffusion de défauts ponctuels. Les auteurs avancent une transition

*.

Application à T $\sim 1000\,[°C]$:	Domaine des fortes contraintes	$\sim 63 < \sigma$	$[MPa]$
	Domaine des contraintes intermédiaires	$\sim 31 < \sigma <\sim 63$	$[MPa]$
	Domaine des faibles contraintes	$\sigma <\sim 31$	$[MPa]$
Application à T $\sim 2000\,[°C]$:	Domaine des fortes contraintes	$\sim 61 < \sigma$	$[MPa]$
	Domaine des contraintes intermédiaires	$\sim 30 < \sigma <\sim 61$	$[MPa]$
	Domaine des faibles contraintes	$\sigma <\sim 30$	$[MPa]$

entre une diffusion qui s'effectue perpendiculairement à la ligne de dislocation (bulk diffusion) et une diffusion qui s'effectue le long de la ligne de dislocation (core diffusion). Le deuxième type de diffusion comporte un coefficient de diffusion $\sim 7-10$ fois supérieur au premier, ce qui pourrait expliquer l'augmentation de l'exposant. Dans ce domaine des fortes contraintes, il semblerait que dans le domaine des basses températures, $T_c < T < T_t$, avec $T_c \sim 1000\,[°C]$ et $T_t \sim 1400\,[°C]$ (températures de transition qui augmentent lorsque la vitesse de déformation augmente) l'exposant n de la loi puissance soit supérieur à 5. Dans le domaine des hautes températures ($T_t < T$), l'exposant aurait tendance à diminuer et revenir vers une valeur $n \sim 5-6$. **Ceci semblerait indiquer que la déformation viscoplastique, dans le domaine des hautes températures, est induite par un mécanisme de Peierls et/ou de montée de dislocations.**

Il est à remarquer que sur ce schéma Fig. II.2 résumant les différents mécanismes, le mécanisme de glissement aux joints de grains n'est pas abordé. Étant donné que certains auteurs l'observent, et en particulier [**Dherbey et al. 2002**] qui lui attribuent 50% de la déformation totale, il semblerait pertinent de l'ajouter. Ce mécanisme de glissement aux joints de grains étudié par [**Ashby et Verrall 1973**] est d'autant plus important que la taille de grain est faible ($\varnothing_{\mathsf{Grain}} \lesssim 10\,[\mu m]$). Il semblerait pouvoir s'exprimer de deux manières. Dans le premier cas ce mécanisme n'est la que pour assurer la continuité des interfaces lors des différents transports de matières (par diffusion, mouvement de dislocations...) et éviter la décohésion des joints de grains (endommagement). Ce cas est associé à un changement de la forme des grains qui s'allongent dans la direction normale à la sollicitation si compression (s'allonge dans la direction de la sollicitation si traction). En résumé, dans ce premier cas, il ne fait qu'accommoder la déformation viscoplastique induite par un autre mécanisme. Dans le deuxième cas, c'est lui qui induit la déformation et ce mécanisme de glissement aux joints de grains est cette fois accommodé par les autres mécanismes pour éviter une décohésion des joints de grains. Dans ce deuxième cas, les grains ne changeront que très peu de formes mais pourront changer de voisin. Ce changement topologique peut être remarqué si le nombre de grains selon la direction de sollicitation diminue en compression (de même en traction).

Pour ce qui est du comportement à la rupture du matériau UO_2 associé aux essais de compression, les fissures se propagent essentiellement de manière transgranulaire à basses températures. Cette propagation devient progressivement intergranulaire lorsque la température augmente. La contrainte de rupture associée est à relier à l'extension du plus gros des défauts dans la structure. [**Tachibana et al. 1979**] utilisent l'équation de Griffith qui semble pertinente et être en accord avec ses résultats (notamment dans le domaine élasto-fragile jusqu'à $T < 1200\,[°C]$). Les mécanismes d'endommagement ne sont pas très clairs. Néanmoins il semblerait qu'il y en ait au moins deux. L'endommagement à basse vitesse de déformation serait supporté par un mécanisme de diffusion (nucléation, croissance de cavités sphériques et coalescence) alors que l'endommagement à forte vitesse de déformation serait supporté par un autre mécanisme (cavités anguleuses). La stoechiométrie semble également fortement influencer l'endommagement.

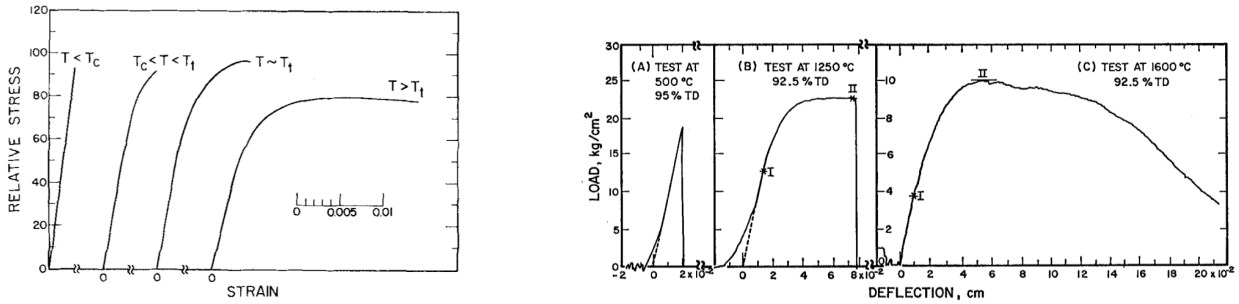
Pour finir [**Ben Saada 2017**] dans ses travaux de thèse remarque qu'il peut y avoir formation, au cours de la déformation, de sous structures et plus particulièrement de sous joints de grains. Ce phénomène abaisserait la taille moyenne de grains du polycristal et pourrait alors favoriser le mécanisme de glissement aux joints de grains (ce dernier mécanisme n'est pas observé par [**Ben Saada 2017**] même si celui-ci émet des réserves car ce mécanisme est compliqué à observer en pratique). À noter également que la capacité des joints de grains, à agir comme obstacles pour les lignes de dislocations, semblerait décroître lorsque la température augmente, du moins un mécanisme pourrait remobiliser les lignes de dislocations.

II.1.2.2 Essais de flexion à l'échelle macroscopique

II.1.2.2.1 Références analysées

Afin d'étudier le comportement du dioxyde d'uranium UO_2 sur des essais de flexion, les articles de [**Scott et al. 1959**], [**Armstrong et al. 1962**], [**Armstrong et Irvine 1963**], [**Armstrong**

et Irvine 1964], [**Tottle 1965**], [**Evans et Davidge 1969**], [**Canon et al. 1971**], [**Roberts et Ueda 1972**], [**Roberts 1975**], [**Radford 1979**], [**Oguma 1982**] et [**Yust et Roberts 1973**] ont été étudiés. Afin d'illustrer le propos tenu, certaines illustrations de résultats sont reprises des différents articles mentionnés.

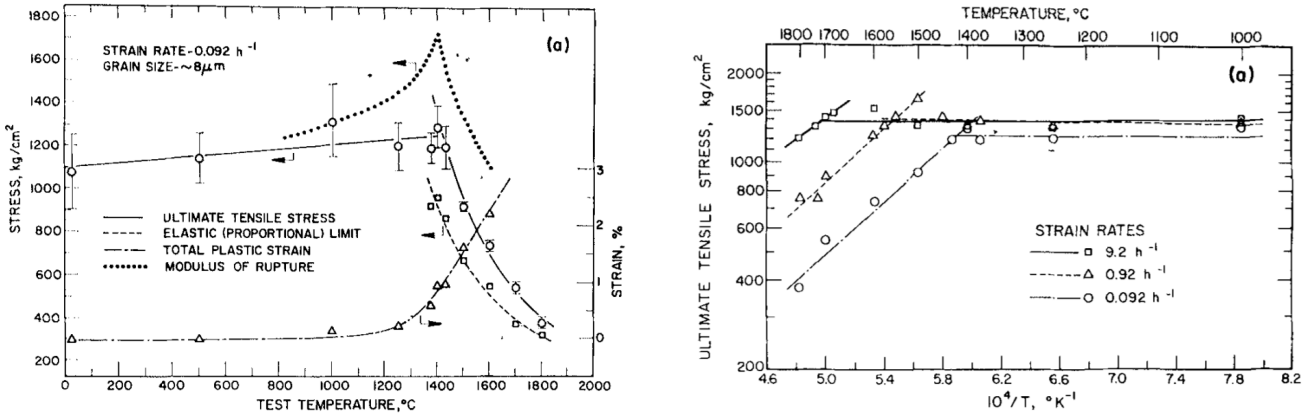


(a) Contrainte en fonction de la déformation de l'UO_2 sur les trois domaines d'étude.

(b) Contrainte en fonction du déplacement de l'UO_2 sur les trois domaines d'étude.

FIGURE II.3 – Illustration des trois domaines d'études en flexion. (a)- [**Canon et al. 1971**] et (b)- [**Roberts et Ueda 1972**]

Les 2 températures de transitions T_c (Fig. II.4a) et T_t (Fig. II.4b) énoncées par [**Canon et al. 1971**] et définissant ainsi trois domaines différents (Fig. II.3a,Fig. II.3b), sont reprises pour étudier le matériau et confronter les différents auteurs.



(a) Définition de la première température de transition T_c^{Canon} pour une vitesse de déformation $\dot{\bar{\varepsilon}} \sim 2.55 \times 10^{-5}\,[s^{-1}]$ et une taille de grain $\varnothing_{Grain} \sim 8\,[\mu m]$.

(b) Définition de la deuxième température de transition T_t^{Canon} et l'impact de la vitesse de déformation $\dot{\bar{\varepsilon}} \sim 2.55 \times \{10^{-3}, 10^{-4}, 10^{-5}\}\,[s^{-1}]$ sur celle-ci pour une taille de grain $\varnothing_{Grain} \sim 8\,[\mu m]$.

FIGURE II.4 – Illustration des deux températures de transitions étudiées. [**Canon et al. 1971**]

Deux éléments sont à noter. D'une part l'article de [**Canon et al. 1971**] date de 1971 soit après les dates des premiers articles étudiés au sein de ce document. Certains de ces auteurs n'ont donc pas explicitement analysé le comportement du dioxyde d'uranium sur les 3 domaines définis par [**Canon et al. 1971**]. Néanmoins un rapprochement peut être fait. D'autre part les deux températures de transition T_c^{Canon} et T_t^{Canon} sont dépendantes de la vitesse de déformation comme l'indique [**Canon et al. 1971**]* et comme illustré Fig. II.4b pour la deuxième température de transition. Il paraît imprudent d'extrapoler les résultats de [**Canon et al. 1971**] hors de son domaine de définition†.

Lorsque la vitesse de déformation augmente les températures de transitions augmentent.

Au-delà des observations de l'impact de la vitesse de déformation sur la température de transition, la taille de grain semble également impacter cette dernière. Sur ce dernier point, [**Canon et al. 1971**] observent une diminution de la température de transition pour une augmentation de la taille de grain alors qu' [**Evans et Davidge 1969**] observent l'inverse. Les études en flexion se concentrent peu sur ce point.

II.1.2.2.2 Synthèse du comportement en flexion

Pour les essais de flexion, il existe deux températures de transitions (cf. Fig. II.4a,Fig. II.4b), soit 3 domaines où le comportement du dioxyde d'uranium sera différent, mais plus ou moins cohérent sur le domaine considéré. Comme évoqué précédemment ces températures de transitions sont dépendantes de la vitesse de déformation (premier ordre) et de certains paramètres comme la porosité ou la taille de grain (deuxième ordre).

Dans le premier domaine des basses températures ($T < T_c^{\text{Canon}}$ cf. Fig. II.4a), le comportement du matériau est considéré élastique fragile. La contrainte de rupture est inférieure à la limite élastique. La fissure est initiée dans la fibre externe sous tension (poutre) par le plus gros des défauts préexistant dans la structure. La propagation se fait de manière transgranulaire (même si certains relèvent une propagation majoritairement intergranulaire). Pour simplifier, il n'y a pas de mouvement de dislocations dans ce domaine. L'augmentation de la porosité (et de la taille de grain dans une moindre mesure) entraîne une diminution logique de la contrainte de rupture. Logique car les défauts préexistants seront plus gros, plus nombreux ce qui facilitera l'initiation de la fissure et sa propagation.

Dans le deuxième domaine, domaine considéré comme intermédiaire ou domaine de transition ($T_c^{\text{Canon}} < T < T_t^{\text{Canon}}$ cf. Fig. II.4a, Fig. II.4b), de faibles taux de déformation plastique ($1-2\%$) et une déviation à la linéarité dans les courbes contraintes déformations sont observés. C'est un domaine charnière dans le sens où plusieurs mécanismes peuvent être impliqués. Suivant le mécanisme et les conditions de fabrication des échantillons d'UO_2, la variation de certains paramètres peut amener des conclusions totalement différentes. Les mécanismes présents dans ce domaine sont le mécanisme des mouvements de dislocations, de glissement aux joints de grains (réduit mais il y en a quand même) et de diffusions. Le mécanisme dominant serait vraisemblablement le mouvement des dislocations (mouvement qui se passerait sur la famille $\{100\}$. Les familles de l'UO_2 sont présentés plus loin dans le document, cf. Fig. II.16). Une augmentation de la porosité augmenterait les obstacles et donc par extension la contrainte de rupture. La contrainte augmente pour que les dislocations puissent passer les obstacles. Plus on se rapproche de la deuxième température de transition T_t, plus le taux de déformation plastique sera important et donc par extension, plus l'activité des lignes de dislocations sera importante. L'hétérogénéité de l'activité des mouvements de dislocations dans les grains est due à l'hétérogénéité du champ de contrainte régnant dans le polycristal. La fissure peut être issue du plus gros des défauts préexistants dans la structure comme dans le domaine fragile ou, peut être issue d'un défaut résultant de l'activité des mouvements de dislocations. En effet, une agglomération de lignes de dislocations sur les joints des grains ou sur des défauts constitueront un défaut pouvant initier la rupture. Ce domaine est un domaine de transition dans le sens où la fissure se propagera de manière transgranulaire proche de T_c et de manière intergranulaire proche de T_t. Il est à noter que certains auteurs n'observent que des fissures qui se propagent de manière intergranulaire.

Dans le troisième domaine ($T_t^{\text{Canon}} < T$ cf. Fig. II.4b), de forts taux de déformation plastique sont observés ($\bar{\varepsilon} \sim 15-20\%$). Les mécanismes seraient les mouvements de dislocations (à l'intérieur du grain mais également la montée de dislocations et le glissement dévié) et le glissement aux joints de grains. La montée de dislocations expliquerait en partie le glissement aux joints de grains. Le

*. Avec $T_c^{Canon} = \{1100, 1375, 1450\}\,[°C]$ pour $\dot{\bar{\varepsilon}} = 2.55 \times \{10^{-5}, 10^{-4}, 10^{-3}\}\,[s]^{-1}$
Et $T_t^{Canon} = \{1403, 1550, 1725\}\,[°C]$ pour $\dot{\bar{\varepsilon}} = 2.55 \times \{10^{-5}, 10^{-4}, 10^{-3}\}\,[s]^{-1}$ [**Canon et al. 1971**].

†. Essais de [**Canon et al. 1971**] : $T < 1800\,[°C]$ et $\dot{\bar{\varepsilon}} = 2.55 \times \{10^{-5}, 10^{-4}, 10^{-3}\}\,[s]^{-1}$.

glissement aux joints de grains contribuerait, et ce de manière non négligeable, au fort taux de déformation plastique observé. Ce glissement aux joints de grains n'est pas encore très clair. Les auteurs observent des micros fissures situées en intergranulaire et qui finissent par dégénérer en fissures macroscopiques avec une propagation intergranulaire.

Certains auteurs sembleraient s'accorder sur l'activation d'une seule famille même dans ce domaine, celle de la famille {100}. Deux manières peuvent permettre l'accommodation des sur-contraintes dans les zones des défauts ou points triples du polycristal. Elles peuvent être accommodées soit par le mouvement des dislocations qui se ferait sur 5 plans de glissement indépendants ou soit par le glissement aux joints de grains. Étant donné que le glissement aux joints de grains est observé et que la famille {100} possède la contrainte résolue de cisaillement critique la plus basse, c'est logiquement celle-ci qui devrait s'activer. Vraisemblablement, à cause de l'hétérogénéité du champ de contrainte toujours persistante dans le polycristal, les deux phénomènes devraient avoir lieu.

II.1.3 Essais macroscopiques sur combustible vierge - Condition accidentelle d'insertion de réactivité (RIA)

II.1.3.1 Introduction

Les essais expérimentaux de compression uniaxée à vitesses de déformation imposées tirés des travaux de **[Salvo 2014]** sont utilisés dans la suite de cette thèse. Ces essais ont été retenus pour plusieurs raisons. D'une part, les données sont accessibles et complètes dans le sens où les détails sur la micro structure sont connus, les données des courbes contraintes-déformations ainsi que d'autres caractéristiques sont disponibles. Outre les données, les essais réalisés pendant les travaux de thèse de **[Salvo 2014]** présentent la particularité d'approcher les vitesses de déformation d'un accident d'insertion de réactivité. Les vitesses de déformation atteintes lors d'un accident d'insertion de réactivité sont particulièrement élevées* et la littérature ne fournit que peu d'exemples d'essais approchant ces vitesses†. L'étude des résultats des essais expérimentaux de **[Salvo 2014]** est donc traitée à part. Les courbes expérimentales obtenues sont confrontées aux différents mécanismes et domaines mis en avant dans les parties précédentes.

II.1.3.2 Caractéristiques des différents lots et résultats après essais [Salvo 2014]

II.1.3.2.1 Lot de référence dit de faible densité

	$\rho \sim 96.4 \pm 0.3\%$		Densité	
	$\varnothing_{\text{Grain}} \sim 10 \pm 0.9\,[\mu m]$		Taille de grain moyenne‡	
Taille au centre :	$\varnothing_{\text{Grain}} < 10\,[\mu m]$	$\sim 67\%$	Proportion [Nombre]	
	$\varnothing_{\text{Grain}} < 20\,[\mu m]$	$\sim 97\%$	Proportion [Nombre]	
Distribution de la porosité :	$\varnothing_{\text{Poro}} \sim 2.1\,[\mu m]$	$\sim 13\%$	Proportion en intergranulaire	(II.4)
	$\varnothing_{\text{Poro}} \sim 0.4\,[\mu m]$	$\sim 87\%$	Proportion en intragranulaire	
Matrice (paramètres des 16 essais) :	$T \sim \{1100, 1350, 1550, 1700\}$		Température $[°C]$	
	$\dot{\bar{\varepsilon}} \sim \{10^{-4}, 10^{-3}, 10^{-2}, 10^{-1}\}$		Vitesse de déformation $[s]^{-1}$	
Stoechiométrie :	$\chi_{O/U} = 2.00 \pm 0.001$	$[-]$		

Lors de ses essais sur le lot de référence Eq. II.4, **[Salvo 2014]** observe une mise en tonneau systématique des échantillons. Il remarque également des fissures macroscopiques pour les essais menés à $T \sim 1100\,[°C]$ ou à $\dot{\bar{\varepsilon}} \sim 10^{-1}\,[s]^{-1}$. Outre le fait d'observer une augmentation de la contrainte lorsque la vitesse de déformation augmente ou lorsque la température diminue, ses travaux permettent de retrouver la disparition du pic de compression lorsque la température augmente. Cette disparition avait été observée par **[Guerin 1975]** et **[Tachibana et al. 1976]**. Il est à noter que la pente d'écrouissage diminue lorsque la température augmente et lorsque la vitesse de déformation diminue (voir Annexe B.1). Pour ce lot de référence dit de faible densité, **[Salvo 2014]** semblerait observer une densification des échantillons avec une densité finale de l'ordre de $\rho^{\text{Finale}} \sim 97.4 \pm 1.1\%$ (pour les essais menés à $T \sim \{1550, 1700\}\,[°C]$) à mettre en perspective avec la densité initiale $\rho^{\text{Initiale}} \sim 96.4 \pm 0.3\%$. Cette densification ou perte de porosité, aurait essentiellement lieu à la périphérie du plan médian et au centre de l'échantillon ($-1/2\%$ de porosité). Dans ces zones, les pores de $\varnothing_{\text{Pore}} > 4\,[\mu m]$ (essentiellement des pores intergranulaires donc), auraient disparu pour l'essai mené à $T \sim 1700\,[°C]$. L'auteur observe également un aplatissement des grains avec un ratio, entre le diamètre moyen dans

∗. Les vitesses de déformation d'un accident d'insertion de réactivité se trouvent dans l'intervalle suivant : $\dot{\bar{\varepsilon}} \in [10^{-1}, 10]\,[s]^{-1}$.

†. Il semblerait que seul **[Tachibana et al. 1976]** ait utilisé une vitesse proche de $\dot{\bar{\varepsilon}} \sim 10^{-1}\,[s]^{-1}$ dans ses essais.

‡. Avec $\varnothing_{\text{Grain}}$ représentant le diamètre du grain.

la direction parallèle à la direction de sollicitation et le diamètre moyen dans la direction orthogonale à la direction de sollicitation à l'état final, de $\frac{d_{moy\parallel}}{d_{moy\perp}} \sim 0.82$ contre l'unité à l'état initial. Les grains se déforment axialement et supportent jusqu'à 16% de la déformation de l'échantillon. Au-delà de ces observations, l'auteur obtient un exposant de la loi puissance de l'ordre de $n >> 5$. Ce dernier augmente lorsque la température augmente.

II.1.3.2.2 Lot de forte densité

	$\rho \sim 98.1 \pm 0.3\%$		Densité
	$\varnothing_{\text{Grain}} \sim 14 \pm 1.1\,[\mu m]$		Taille de grain moyenne*
Taille au centre :	$\varnothing_{\text{Grain}} < 10\,[\mu m]$	$\sim 40\%$	Proportion [Nombre]
	$\varnothing_{\text{Grain}} < 20\,[\mu m]$	$\sim 80\%$	Proportion [Nombre]
Distribution de la porosité :	$\varnothing_{\text{Poro}} \sim 1.2\,[\mu m]$	$\sim 17\%$	Proportion en intergranulaire
	$\varnothing_{\text{Poro}} \sim 0.4\,[\mu m]$	$\sim 83\%$	Proportion en intragranulaire
Matrice (paramètres des 16 essais) :	$T \sim \{1100, 1350, 1550, 1700\}$		Température $[°C]$
	$\dot{\bar{\varepsilon}} \sim \{10^{-4}, 10^{-3}, 10^{-2}, 10^{-1}\}$		Vitesse de déformation $[s]^{-1}$
Stoechiométrie :	$\chi_{O/U} = 2.00 \pm 0.001$		$[-]$

(II.5)

Le lot à forte densité Eq. II.5 se distingue du lot faible densité Eq. II.4 essentiellement par la porosité située en intergranulaire (située aux joints de grains). La taille moyenne de ces dernières pour le lot forte densité est relativement faible. **[Salvo 2014]** observe ainsi que les contraintes d'écoulement issues du lot de référence (dit de faible densité) sont systématiquement plus faibles que celles issues du lot forte densité à même température et même vitesse de déformation (voir Annexe B.2, attention la convention pour calculer cette contrainte n'est pas la même que celle adoptée par **[Salvo 2014]**). Cette observation est à relier aux études sur la porosité présentées précédemment. Cette dernière, située aux joints de grains peut permettre une accommodation de la déformation par glissement aux joints de grains. Cette accommodation ne se fait que plus difficilement dans le lot forte densité. **[Salvo 2014]**, de la même manière que sur le lot faible densité, observe une mise en tonneau systématique des échantillons sur le lot forte densité. Il remarque également des fissures macroscopiques (fissures axiales de quelques millimètres) pour les essais menés à $T \sim 1100\,[°C]$ ou $\dot{\bar{\varepsilon}} \sim 10^{-1}\,[s]^{-1}$. L'essai mené à $T \sim 1100\,[°C]$ et $\dot{\bar{\varepsilon}} \sim 10^{-1}\,[s]^{-1}$ a lui, totalement rompu. De même, l'auteur observe une augmentation de la contrainte d'écoulement lorsque la vitesse de déformation augmente ou lorsque la température diminue. Lorsque la température augmente et lorsque la vitesse de déformation diminue, le pic de contraintes disparaît. De même, la pente d'écrouissage des essais diminue lorsque la température augmente et lorsque la vitesse de déformation diminue (voir Annexe B.1). Au contraire du lot faible densité, l'auteur n'observe pas ou peu de variation de densité (porosité) (légère diminution pour les essais menés à $T \sim \{1550, 1700\}\,[°C]$ - légère augmentation (porosité ouverte) pour les essais menés à $T \sim \{1100, 1350\}\,[°C]$). La porosité de l'échantillon n'évolue pas significativement selon les zones étudiées. Cependant, sur ce lot forte densité et dans le centre des échantillons, **[Salvo 2014]** remarque une décohésion des joints de grains après des observations MEB sur les essais à $T \sim \{1550, 1700\}\,[°C]$ et $\dot{\bar{\varepsilon}} \sim 10^{-1}\,[s]^{-1}$. Les autres essais n'ont pas donné de décohésion des joints de grains†.

II.1.3.3 Courbes expérimentales obtenues [Salvo 2014]

L'essai de compression uniaxée induit une mise en tonneau de l'échantillon. Cela a été relevé notamment par **[Guerin 1975]** mais également par d'autres auteurs comme **[Tachibana et al.**

∗. Avec $\varnothing_{\text{Grain}}$ représentant le diamètre du grain.

†. **[Salvo 2014]** ne fait pas mention de décohésion des joints de grains sur le lot faible densité.

1976].

Étant donné que [**Salvo 2014**] fournit les déformations vraies, il a été décidé de corriger les contraintes (cf. Eq. II.6), et ce afin de rester cohérent (courbes contraintes vraies - déformations vraies). Cette correction est une approximation. Elle s'appuie sur l'hypothèse de calcul ($\mathcal{H}_0$ cf. Eq. II.6). Cette dernière est relativement forte dans le sens où la correction n'est valide que dans le régime visco-plastique établi. Les graphiques de cette sous-partie sont donc présentés avec la déformation vraie ($\bar{\varepsilon}_{33}^{\text{Corr}}$ cf. Eq. II.6) et la contrainte corrigée ($\bar{\sigma}_{33}^{\text{Corr}}$ cf. Eq. II.6), contrainte se rapprochant de la contrainte vraie dans le domaine visco-plastique établi.

$$\bar{\varepsilon}_{33} = ln\left(1 + \frac{u_{33}}{h_0}\right)$$

Avec :	u_{33}	Déplacement imposée : sens de sollicitation	$[m]$
	h_0	Hauteur initiale de l'échantillon	$[m]$
	$\bar{\varepsilon}_{33}$	Déformation vraie déduite : sens de sollicitation	$[-]$

$$\bar{\sigma}_{33} = \frac{F_{33}}{S_0}$$

Avec :	F_{33}	Force relevée : en réaction au déplacement	$[N]$
	S_0	Surface initiale de l'échantillon	$[m]^2$
	$\bar{\sigma}_{33}$	Contrainte déduite : sens de sollicitation	$[MPa]$

Correction de la contrainte envisagée : (II.6)

$$\bar{\sigma}_{33}^{\text{Corr}} = \frac{F_{33}}{S_0} \times \frac{S_0}{S(t)}$$

Avec : $S(t) = \pi\left(r_0 + u_r(t)\right)^2$ Surface actualisée sous l'hypothèse ($\mathcal{H}_0$) $[m]^2$

$$(\mathcal{H}_0) : \quad \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\boldsymbol{r}} = -\frac{1}{2} \times \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathbf{33}}$$

Avec :	$\bar{\varepsilon}_r = ln\left(1 + \frac{u_r}{r_0}\right)$	Déformation : sens transverse à la sollicitation	$[-]$
	r_0	Rayon initial de l'échantillon	$[m]$

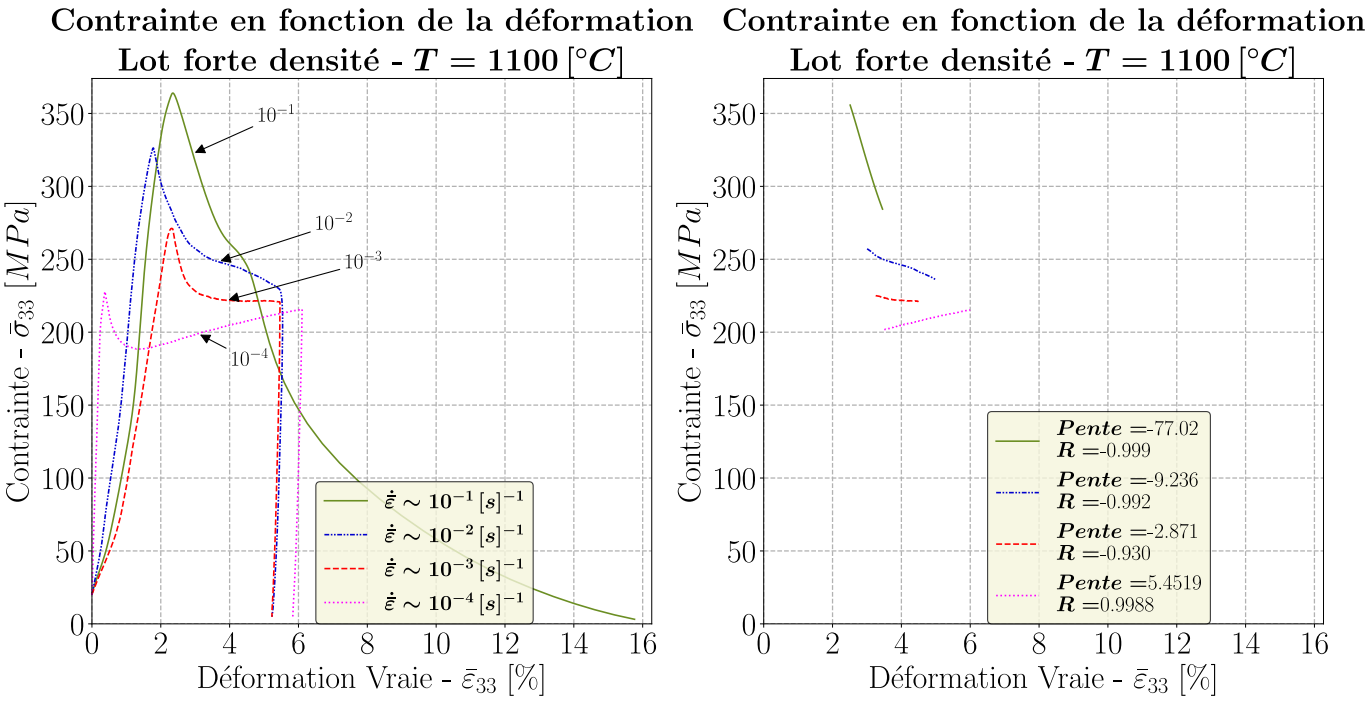
D'où : $u_r(t) = r_0 \times \left[exp\left(-\frac{1}{2} \times \bar{\varepsilon}_{33}\right) - 1\right]$ Déplacement transverse $[m]$

Les graphiques de gauche (cf. Fig. II.5), regroupent et balaient l'ensemble des données issues de l'expérimental pour le lot forte densité. Les courbes de droite ne sont qu'un extrait de ces courbes afin de pouvoir effectuer une régression linéaire sur la partie qui se voudrait « linéaire » (écrouissage apparent). Un dernier graphique en échelle logarithmique (log_{10}) de la vitesse de déformation en fonction de la contrainte a également été tracé afin de récupérer l'exposant éventuel de la loi puissance et le comparer à la littérature si cela est possible.

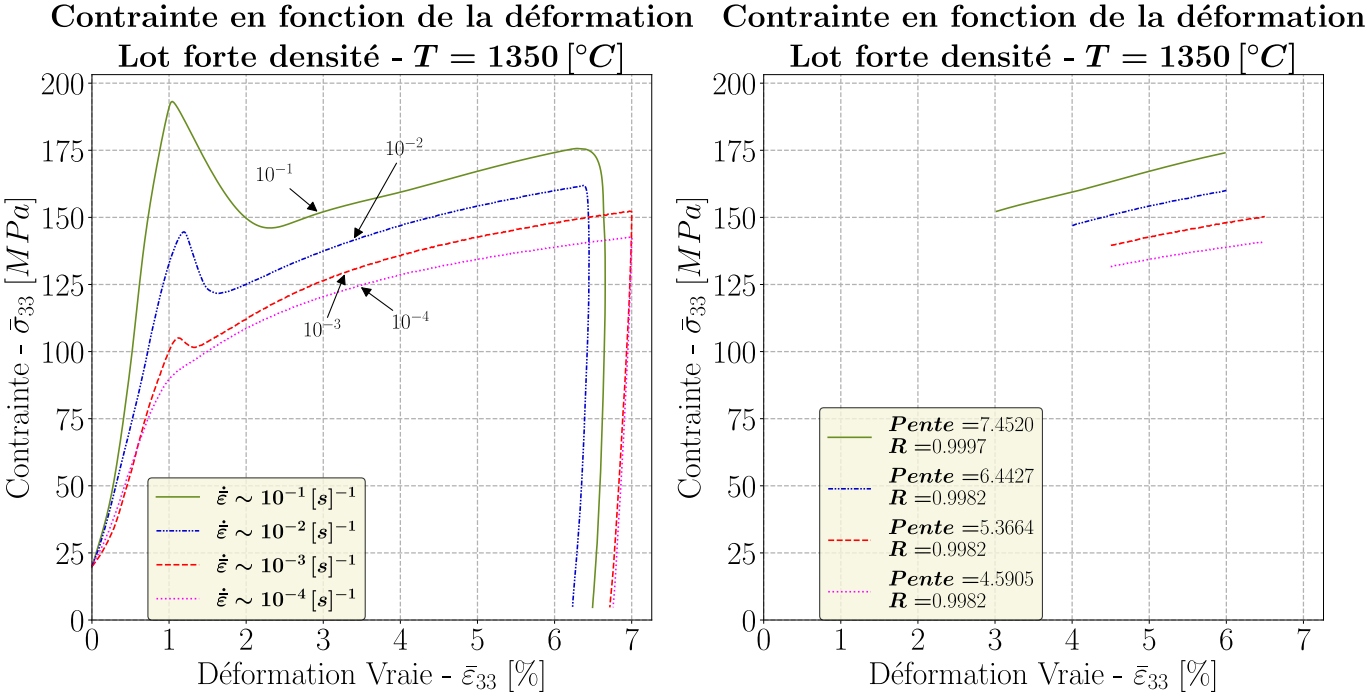
Pour ce qui est du lot forte densité, les courbes contraintes déformations sont regroupées sur les figures Fig. II.5-Fig. II.6 et la courbe logarithmique correspondante est exposée Fig. II.7.

L'allure des courbes à $T \sim 1100\,[°C]$ et à fortes vitesses de déformation $\dot{\bar{\varepsilon}} \in [10^{-1}, 10^{-3}]\,[s]^{-1}$, voir Fig. II.5-(a), sont complètement différentes des autres courbes. Ceci semblerait traduire l'impact de la vitesse de déformation sur la température de transition fragile ductile.

Cette température de transition, habituellement située à $T \sim 1000\,[°C]$, augmente lorsque la vitesse de déformation augmente (cf. parties précédentes). Cette dernière ne doit pas dépasser $T \sim 1350\,[°C]$ car à cette température, même l'échantillon sollicité avec la vitesse de déformation la plus élevée exhibe un taux de déformation de l'ordre de $\bar{\varepsilon} \sim 6\,[\%]$ signe que l'échantillon s'est déformé plastiquement. De ce fait, la figure Fig. II.7 ne comporte pas les données issues de la température $T \sim 1100\,[°C]$. Les courbes des figures Fig. II.6-(a)-(b) sont relativement originales dans le sens où l'on pourrait s'attendre à avoir une augmentation du taux de déformation avant rupture lorsque la



(a) $T \sim 1100\,[°C]$.

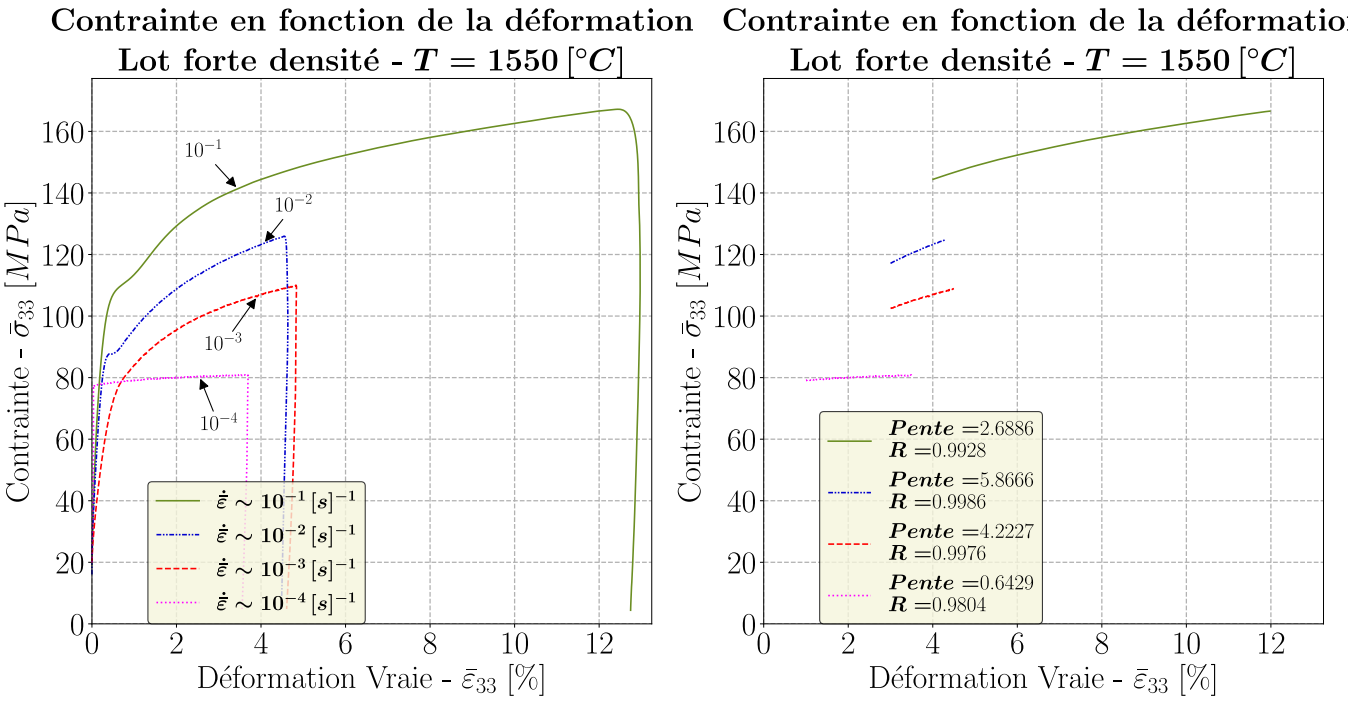


(b) $T \sim 1350\,[°C]$.

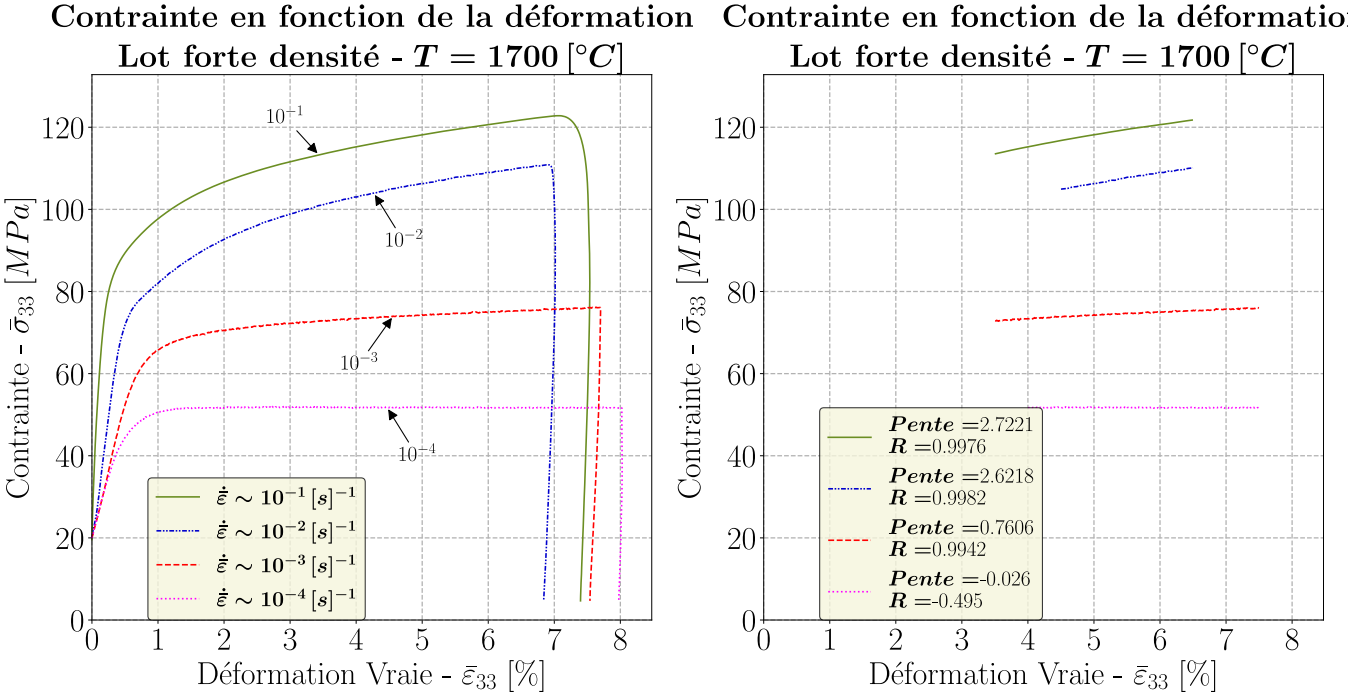
FIGURE II.5 – À Gauche : Courbes contraintes déformations du lot forte densité.
À droite : Régression linéaire de la partie « linéaire » des courbes contraintes déformations.
Issues des données de **[Salvo 2014]** : $T \sim \{1100, 1350\}\,[°C]$.

température augmente. Ce n'est pas le cas pour les 3 plus faibles vitesses de déformations.

Classiquement, les observations des différents auteurs sur l'impact de la variation de vitesse de déformation et de la température sur les courbes contraintes déformations sont retrouvées. Lorsque la vitesse de déformation augmente, ou lorsque la température diminue, les caractéristiques mécaniques (contraintes, contraintes d'écoulement, limite élastique, contraintes de rupture) augmentent. Plus la température augmente, plus le taux de déformation avant rupture devrait être important. Ceci n'est pas toujours vérifié sur le lot forte densité. Pour ce qui est des pentes d'écrouissage, il serait



(a) $T \sim 1550\,[°C]$.



(b) $T \sim 1700\,[°C]$.

FIGURE II.6 – À Gauche : Courbes contraintes déformations du lot forte densité.
À droite : Régression linéaire de la partie « linéaire » des courbes contraintes déformations.
Issues des données de **[Salvo 2014]** : $T \sim \{1550, 1700\}\,[°C]$.

attendu que ces dernières aient la même tendance que les caractéristiques mécaniques vis-à-vis de la variation à la vitesse de déformation et de la température. Pour ce lot, ceci est vérifié pour les vitesses de déformation comprises dans le domaine $\dot{\bar{\varepsilon}} \in [10^{-1}, 10^{-4}]\,[s]^{-1}$. Cette décroissance dépend fortement du tronçon de la courbe contrainte déformation considérée. Pour l'analyse des courbes contraintes déformations, les pentes issues des essais à la température $T \sim 1100\,[°C]$ et aux vitesses de déformation $\dot{\bar{\varepsilon}} \in [10^{-1}, 10^{-3}]\,[°C]$ devraient être écartées. Ainsi il est à noter que la pente d'écrouissage diminue lorsque la température augmente ou lorsque la vitesse de déformation

diminue (voir Annexe B.1), exception faite entre les pentes issues des vitesses de déformations les plus élevées ($\dot{\bar{\varepsilon}} = \{10^{-1}, 10^{-2}\}\,[s]^{-1}$). Pour une température de l'ordre de $T \sim 1700\,[°C]$ et pour la plus faible vitesse de déformation, la pente d'écrouissage est quasiment nulle, le matériau ne durcit presque pas. Le comportement du matériau tend vers un comportement plastique parfait lorsque la température augmente. Il semblerait qu'une augmentation de la vitesse de déformation, augmente la température pour laquelle le comportement devient plastique parfait (pente d'écrouissage nul). Cette phrase est au conditionnel car les essais expérimentaux ne permettent pas de vérifier qu'au delà de $T \sim 1700\,[°C]$, la pente d'écrouissage diminue lorsque la température augmente et ce même pour la vitesse de déformation la plus élevée.

Finalement le pic de compression est présent pour les températures relativement faibles testées et disparaît lorsque cette dernière augmente ou lorsque la vitesse de déformation diminue. Cela est visible sur la figure Fig. II.6-(b).

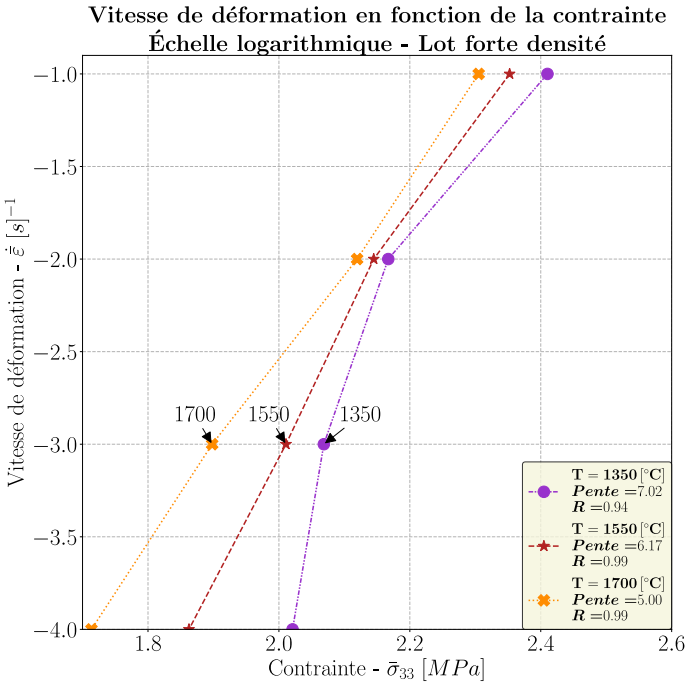
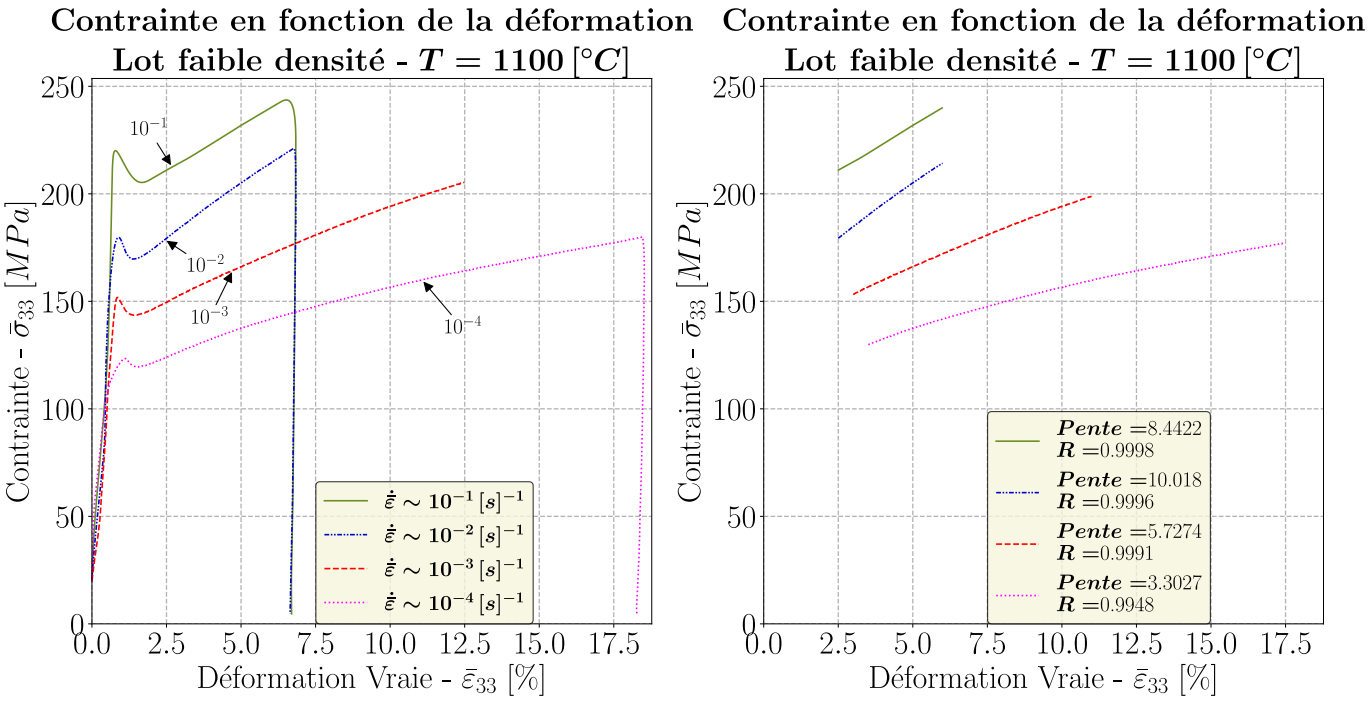


FIGURE II.7 – Vitesse de déformation en fonction de la contrainte, échelle logarithmique. Issue des données de **[Salvo 2014]**, lot forte densité.

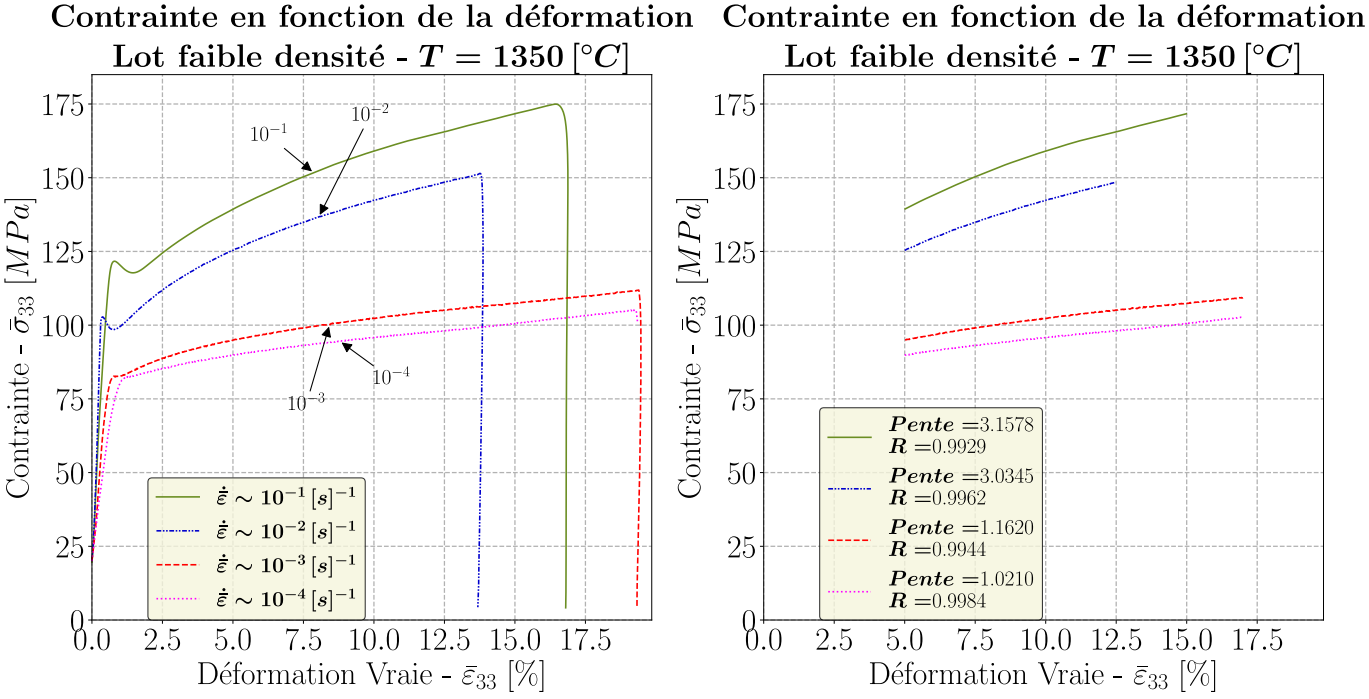
Comme pour les courbes contraintes-déformations, la figure Fig. II.7 ne s'appuie pas sur les essais réalisés à $T \sim 1100\,[°C]$ et ce pour les raisons évoquées précédemment, à savoir que le comportement est, à cette température et pour ces vitesses de déformations, vraisemblablement fragile plutôt que ductile. La pente correspond à l'exposant de la loi puissance et diminue lorsque la température augmente. L'exposant obtenu est de l'ordre de $n >> 5$. La loi puissance n'est donc plus adéquate pour modéliser le comportement du dioxyde d'uranium pour cette gamme de sollicitation. La contrainte obtenue, voir figure Fig. II.7, est généralement au dessus de $\sigma > 60\,[MPa]$, qui correspond au domaine des fortes contraintes identifié sur les essais de fluage. L'exposant est en accord avec le domaine des fortes contraintes.

Pour ce qui est du lot faible densité, les observations sont sensiblement les mêmes. D'après les figures Fig. II.8-Fig. II.9, figures représentant les courbes de contraintes déformations, issues du lot de faible densité dit de référence, lorsque la température augmente ou lorsque la vitesse de déformation diminue, les caractéristiques mécaniques (contraintes, contraintes d'écoulement, limite élastique, contraintes de rupture) diminuent.

Les différences avec les courbes obtenues pour le lot forte densité (Fig. II.5-Fig. II.6) sont multiples. D'une part les échantillons sollicités à $T \sim 1100\,[°C]$ exhibent un taux de déformation avant rupture



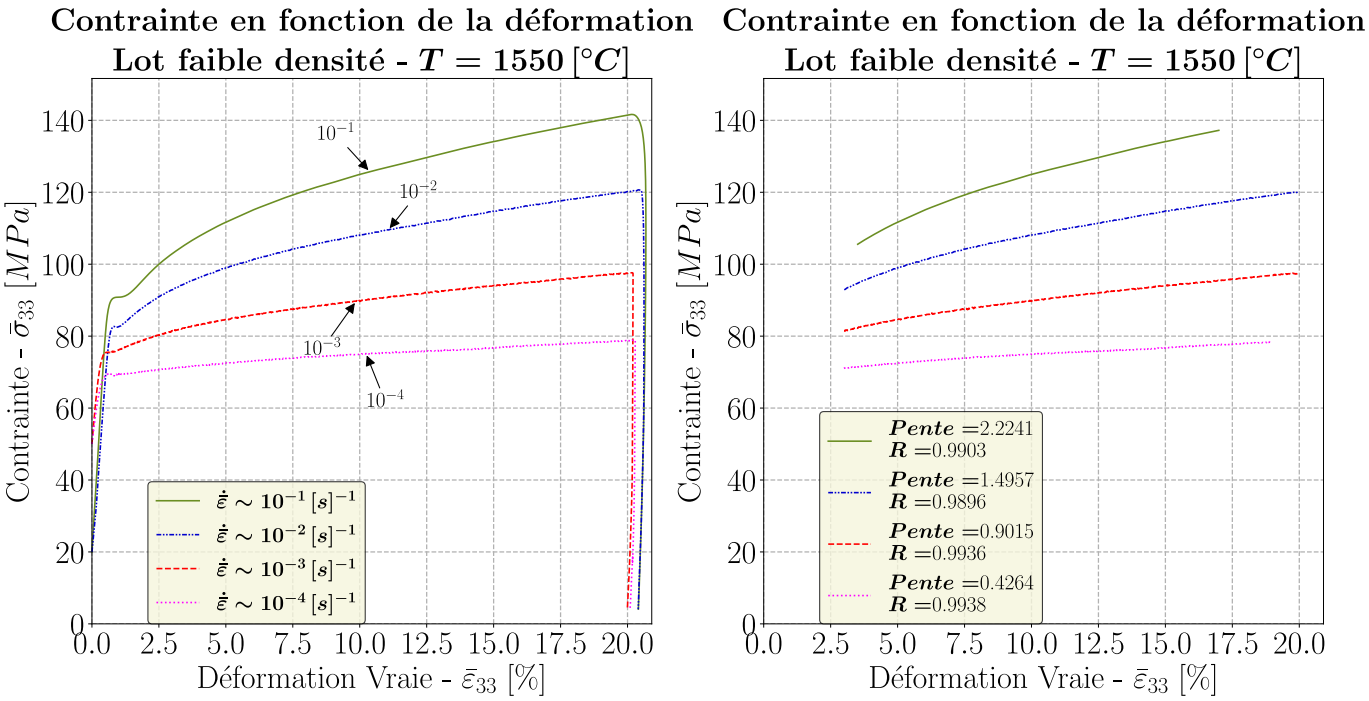
(a) $T \sim 1100\,[°C]$.



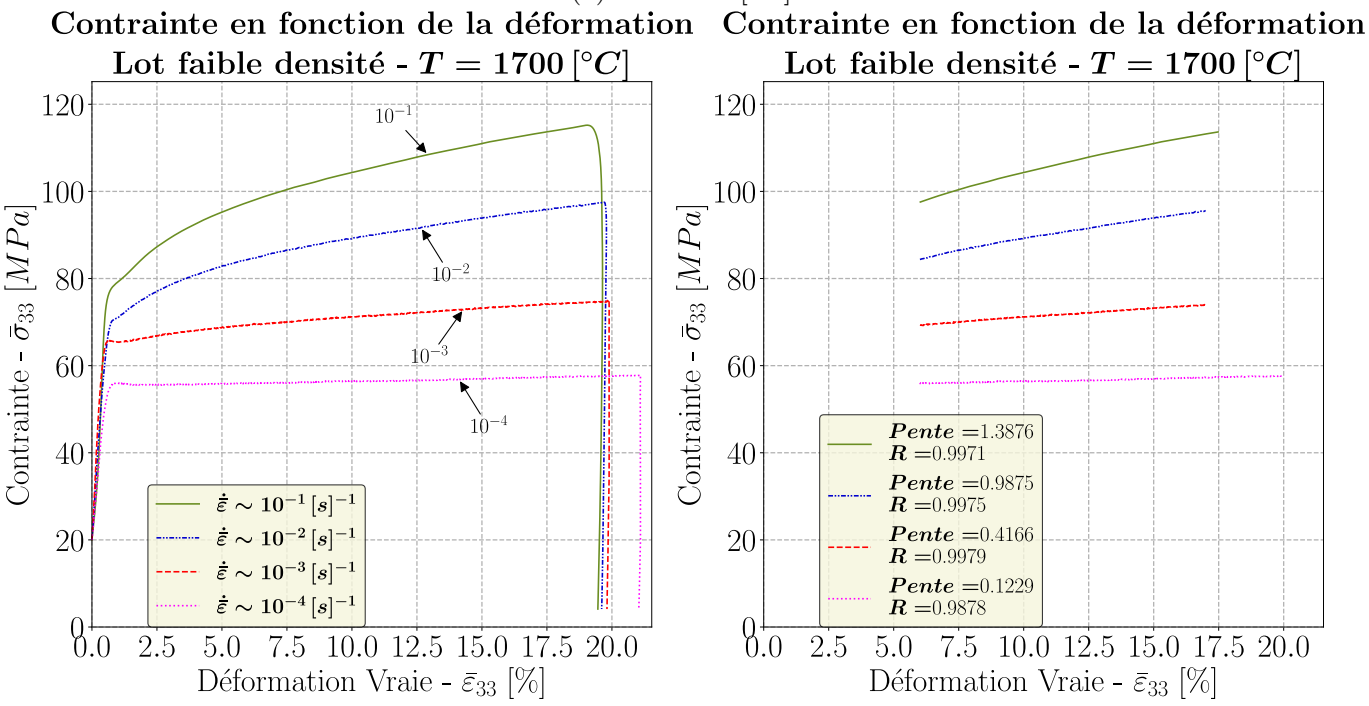
(b) $T \sim 1350\,[°C]$.

FIGURE II.8 – À Gauche : Courbes contraintes déformations du lot faible densité.
À droite : Régression linéaire de la partie « linéaire » des courbes contraintes déformations.
Issues des données de **[Salvo 2014]** : $T \sim \{1100, 1350\}\,[°C]$.

relativement important $\bar{\varepsilon} \sim 6.5\%$ signe que le matériau est dans le domaine ductile contrairement au lot forte densité. La température de transition est donc à la fois dépendante de la densité (i.e. de la fraction volumique de porosité présente au sein du combustible UO_2) et de la vitesse de déformation a minima. Les résultats et l'impact de la variation des paramètres sont plus clairs pour ce lot. L'augmentation de la température ou la baisse de la vitesse de déformation entraîne une augmentation du taux de déformation avant rupture. Le pic de compression est également observé. Celui-ci finit par disparaître lorsque la température augmente ou lorsque la vitesse de déformation diminue (vérifié



(a) $T \sim 1550\,[°C]$.



(b) $T \sim 1700\,[°C]$.

FIGURE II.9 – À Gauche : Courbes contraintes déformations du lot faible densité.
À droite : Régression linéaire de la partie « linéaire » des courbes contraintes déformations.
Issues des données de **[Salvo 2014]** : $T \sim \{1550, 1700\}\,[°C]$.

à $T \sim \{1100, 1350\}\,[°C]$, à une seule exception près [exception à $T \sim 1100\,[°C]$ et $\dot{\bar{\varepsilon}} \sim 10^{-1}\,[s]^{-1}$]). L'augmentation de la température ou la diminution de la vitesse de déformation engendre une baisse de la pente d'écrouissage. Cette dernière se rapproche d'une pente nulle pour la température la plus élevée et la vitesse de déformation la plus faible (voir Annexe B.1).

Le fait d'avoir baissé la densité (i.e. augmenté la porosité), permet d'obtenir un taux de déformation avant rupture beaucoup plus important. La porosité permettrait d'accommoder la contrainte d'une certaine manière et ainsi accroître le taux de déformation avant rupture.

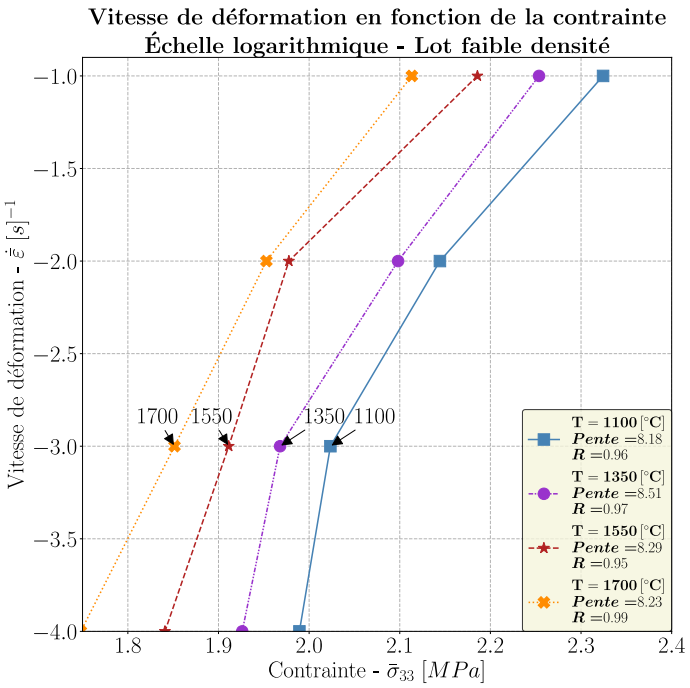


FIGURE II.10 – Vitesse de déformation en fonction de la contrainte, échelle logarithmique. Issue des données de **[Salvo 2014]**, lot faible densité.

D'après la figure Fig. II.10, sur laquelle les pentes représentent les exposants de la loi puissance pour une température donnée, il ne semble pas y avoir une tendance particulière. L'exposant augmente jusqu'à $T \sim 1550\,[°C]$ puis diminue. Ce dernier est de l'ordre de $n >> 5$. Cet ordre de grandeur correspond au domaine des fortes contraintes.

II.1.3.4 Confrontation des résultats [Salvo 2014] avec la littérature

[Tachibana et al. 1976] observent l'impact de la vitesse de déformation sur la température de transition fragile-ductile. De manière analogue, **[Salvo 2014]** lors de ses essais expérimentaux, obtient et confirme l'assertion de **[Tachibana et al. 1976]** lors de son essai mené à $T \sim 1100\,[°C]$ sur le lot forte densité. En effet, il est à remarquer que la courbe de contrainte en fonction la déformation pour une vitesse de $\dot{\bar{\varepsilon}} \sim 10^{-4}\,[s]^{-1}$, est plastique alors que celle-ci pour une vitesse $\dot{\bar{\varepsilon}} \sim 10^{-1}\,[s]^{-1}$ ne comprend pas de plasticité. Cette dernière ne semble comporter que la partie élastique et le début du pic de compression avant d'aboutir à la ruine de l'échantillon. Cela appuie le fait que la température de transition augmente lorsque la vitesse de déformation augmente.

Pour le lot faible densité, étant donné que la forme des grains change de manière non négligeable et au vu de l'exposant de la loi puissance obtenu, le mécanisme induisant la déformation visco-plastique semblerait être le mouvement des lignes de dislocations. Ce mécanisme semblerait être accommodé par le glissement aux joints de grains. Ce glissement aux joints de grains permet notamment de garder l'intégrité du polycristal et d'assurer la continuité entre grains lorsque ces derniers changent de forme. De plus, **[Salvo 2014]** obtient une énergie d'activation de l'ordre de $Q \sim 562\,[kJ].[mol]^{-1}$, à relier à l'énergie d'auto diffusion de l'uranium (U^{4+}) dans la structure cristalline qui est de l'ordre de $Q_{\text{Struc}} \sim 544\,[kJ].[mol]^{-1}$ **(Knorr et al. 1989)**. Étant donné que l'auteur obtient un coefficient de régression linéaire R de l'ordre de $R_Q \sim 0.97$, et que l'énergie d'activation est proche d'une valeur de référence, il semblerait qu'il n'y ait qu'un seul mécanisme à l'œuvre dans le domaine étudié. Ce mécanisme serait donc le glissement des dislocations accommodé par du glissement aux joints de grains et contrôlé par l'auto diffusion du cation uranium (U^{4+}) dans la structure cristalline. Le glissement des dislocations regroupe plusieurs mécanismes (glissement, glissement dévié, montée). Il est à rappeler que **[Tachibana et al. 1976]** envisagent dans le domaine des fortes vitesses de

déformation et dans le domaine où l'exposant $n >> 5$, que le glissement des dislocations soit contrôlé par le franchissement de la barrière de Peierls [**Peierls 1940**]. Les observations ne permettent pas de conclure quant au mécanisme derrière le glissement des dislocations. La montée de dislocations et/ou le glissement dévié pourraient néanmoins contribuer à la déformation et ce d'autant plus que la température est élevée. Cela permettrait d'expliquer la baisse de la pente d'écrouissage observée.

Pour le lot forte densité, il est plus difficile d'avoir un avis étant donné que [Salvo 2014] ne commente pas dans ses travaux ni la forme des grains, ni l'exposant et ni l'énergie d'activation. Néanmoins les calculs montrent que l'exposant est relativement élevé, le mécanisme pourrait être le même que pour le lot faible densité. Le mécanisme pourrait également être le glissement des dislocations (franchissement de la barrière de Peierls [Peierls 1940]) accommodé par du glissement aux joints de grains et contrôlé par l'auto diffusion du cation uranium (U^{4+}) dans la structure cristalline. Néanmoins l'inverse est également possible. Le mécanisme de glissement aux joints de grains pourrait induire la déformation et être accommodé par le glissement des dislocations. Ceci est à approcher des travaux de [Dherbey et al. 2002] qui imputent 50% de la déformation totale au mécanisme de glissement aux joints de grains (les conditions de sollicitations n'étaient pas les mêmes, en l'occurrence dans les travaux de [Dherbey et al. 2002], la vitesse de déformation était relativement faible).

En plus des observations précédentes, il est à noter que lorsque la température augmente et que la vitesse de déformation diminue, la pente d'écrouissage diminue (voir Annexe B.1). Le mécanisme semblerait être le mouvement des dislocations associé au franchissement de la barrière de Peierls [Tachibana et al. 1976 ; Radford et Terwilliger 1975]. En gardant cette dernière hypothèse, pour que le comportement devienne plastique parfait, il faudrait que la température fournisse l'essentiel de l'énergie nécessaire au franchissement de la barrière de Peierls. Le franchissement de la barrière de Peierls peut se faire par un apport thermique et/ou par la contrainte (interaction si le double décrochement est utilisé). Ceci favoriserait le fait que lorsque la température augmente, la contrainte à fournir pour franchir cette barrière diminue. En plus de cet aspect, il faudrait que les joints de grains n'agissent pas comme des obstacles aux mouvements des dislocations ou qu'un mécanisme tiers remobilise les lignes de dislocations bloquées par ces joints de grains. En d'autres termes qu'il n'y ait pas d'accumulation ou d'empilement des dislocations sur les joints de grains. Comme énoncé précédemment, la capacité des joints de grains à agir comme obstacle aux mouvements des lignes de dislocations n'est peut être pas à remettre en cause, un mécanisme tiers (comme le mécanisme de montée de dislocations par exemple) pourrait tout aussi bien remobiliser les lignes de dislocations immobilisées. Ceci entraînerait un équilibre entre les lignes bloquées et les lignes remobilisées. La pente d'écrouissage diminue fortement pour les essais menés à $T \sim 1700\,[°C]$ sans toutefois s'annuler. Le comportement n'est donc pas totalement plastique parfait. Cela semblerait en accord avec les données de [**Burton et Reynolds 1973**]. La vitesse de déformation semblerait avoir un impact sur cette température. Étant donné les fortes vitesses de déformations, et en gardant à l'esprit que la vitesse de déformation est directement reliée aux vitesses des lignes de dislocations, il se pourrait qu'une vitesse suffisante permette un équilibre entre création et annihilation des lignes de dislocations.

Au vue de la littérature, l'endommagement dans le domaine des fortes vitesses de déformation semblerait être imputable au mécanisme de glissement aux joints de grains et plus particulièrement à leur incapacité à accommoder la déformation plastique. Il est à rappeler que [**Salvo 2014**] observe de la décohésion des joints de grains pour $\dot{\bar{\varepsilon}} \sim 10^{-1}\,[s]^{-1}$ et $T \sim \{1550, 1700\}\,[°C]$. Néanmoins, quelle que soit la nature de l'endommagement, l'endommagement peut être pris, à la manière de [**Sauter et Leclercq 2003**], fonction de la déformation plastique totale sans toutefois le relier à un mécanisme en particulier.

II.1.3.5 Synthèse du comportement du dioxyde d'uranium avec des conditions expérimentales se rapprochant de l'accident RIA [Salvo 2014]

En résumé, les résultats **[Salvo 2014]** des essais entre les lots forte et faible densités dit de référence sont bien différents. Les différences se situent principalement sur les contraintes, le taux de déformation avant rupture et l'allure des courbes. Ces différences seraient à imputer à la différence de densité (i.e. à la fraction volumique de porosité de fabrication présente avant essai), seul paramètre variant entre les deux lots. Les contraintes se situent principalement dans le domaine des fortes contraintes, exception faite des essais menés à $T \sim 1700\,[°C]$ et à la plus faible des vitesses de déformation qui place les contraintes dans le domaine des contraintes intermédiaires. En ce sens l'exposant de la loi puissance obtenu est de l'ordre de $n >> 5$. Le mécanisme induisant la déformation visco-plastique semblerait être le mouvement des lignes de dislocations accommodé par du glissement aux joints de grains. L'augmentation de la densité, aurait comme effet d'augmenter la difficulté de ce dernier mécanisme à accommoder la déformation supportée par le glissement des lignes de dislocations. Ce mécanisme de glissement aux joints de grains semblerait être à l'origine de la décohésion des joints de grains observée sur le lot forte densité. Cette décohésion n'est pas observée sur le lot faible densité et étant donnée la différence entre les taux de déformation avant rupture obtenus : il semblerait que l'endommagement entre les deux lots soit différent. La décohésion semblerait être en lien avec la perte de la capacité des joints de grains à agir comme obstacles aux lignes de dislocations ou à l'activité d'un mécanisme tiers permettant la remobilisation des lignes de dislocations bloquées par les joints de grains, comme cela a été invoqué par **[Burton et Reynolds 1973]**, lorsque la température augmente ($T \sim \{1550, 1700\}\,[°C]$). Ceci permettrait d'expliquer la diminution de la pente d'écrouissage lorsque la température augmente et une baisse de la pente d'écrouissage plus importante pour le lot faible densité par rapport au lot forte densité. En d'autres termes, une augmentation de la fraction volumique de porosité au sein du matériau semblerait macroscopiquement réduire également la pente d'écrouissage. La pente d'écrouissage est quasiment nulle pour une température $T \sim 1700\,[°C]$ pour la plus faible vitesse de déformation utilisée. Le comportement de la pastille UO_2 tend donc vers un comportement viscoplastique sans écrouissage lorsque la température augmente. Cette tendance est contrebalancée par les fortes vitesses de déformations qui sembleraient augmenter les températures de transition : ceci serait à confirmer par des essais expérimentaux menés à fortes vitesses de déformation et pour une gamme de températures relativement élevée (jusqu'à $T \sim 2200 - 2300\,[°C]$, températures pouvant être rencontrées en condition accidentelle d'insertion de réactivité).

II.1.4 Loi phénoménologique « L3F » issue de [Salvo 2014]

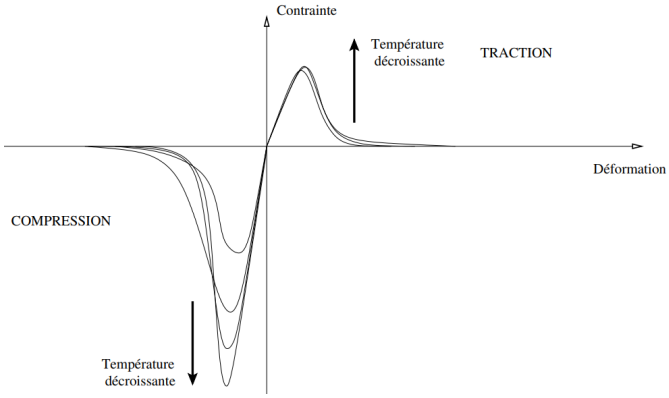
II.1.4.1 La loi phénoménologique « L3F » et ses différentes « composantes »

D'un point de vue expérimental (cf. parties précédentes du document et Fig. II.11-(a)-(b)), il est à noter que le comportement du combustible UO_2 en compression semble différent du comportement en traction selon la vitesse de déformation et la gamme de température imposées. Pour ce qui est de la compression, il existe deux domaines avec une seule température de transition T_{compr}. En dessous de cette température de transition ($T < T_{\mathsf{compr}}$) le comportement est purement élastique fragile avec une contrainte à rupture inférieure à la contrainte élastique. Au-dessus de cette température de transition ($T_{\mathsf{compr}} < T$), jusqu'à 20% de déformation plastique peut être cumulée. Pour ce qui est de la flexion, le comportement est divisé en trois domaines avec deux températures de transition T_c et T_t. Pour une température inférieure à la première température de transition ($T < T_c$), le comportement est élastique fragile. Pour une température intermédiaire ($T_c < T < T_t$), le comportement est semi-fragile. Les propriétés mécaniques augmentent légèrement (contrainte à rupture). Le matériau peut cumuler jusqu'à $1-2\%$ de déformation plastique. Pour le dernier domaine ($T_t < T$), le comportement est similaire au deuxième domaine de compression. En plus d'avoir deux températures de transition, ces dernières augmentent proportionnellement avec la vitesse de déformation ($\dot{\bar{\varepsilon}}$). Les essais réalisés en flexion sur lesquels se base cette analyse sont bornés en température ($T < 1800\,[°C]$) et en vitesse de déformation ($\dot{\bar{\varepsilon}} < 10^{-3}\,[s]^{-1}$).

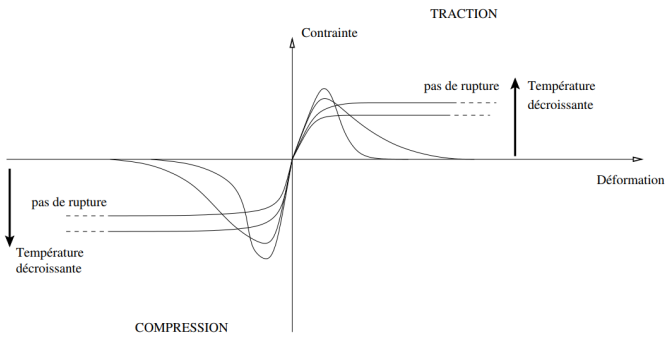
Nota Bene : Le matériau est à la fois en traction et en compression lors des essais de flexion. Comme l'explique **[Scott et al. 1959]** *dans leur article, le champ de contrainte obtenu dans une poutre lors d'un essai de flexion est plus complexe qu'un champ de contrainte obtenu dans cette même poutre pour un essai de traction uniaxée ou de compression uniaxée. En ce sens les micros fissures, fissures et leurs propagations peuvent réagir différemment. Le comportement macroscopique en traction ne peut donc pas être déduit de ces essais de flexion. Il semble néanmoins correct de dire que le comportement de l'UO_2 (matériau faisant partie des céramiques) en traction semble différent du comportement en compression. Dans le cas contraire le même comportement serait observé lors des essais de flexion et de compression sur pastille combustible UO_2 ce qui expérimentalement n'est pas le cas. Il faudrait effectuer une campagne d'essais en appliquant une traction simple sur des pastilles combustibles tout en faisant varier la température et la vitesse de déformation pour le vérifier. Néanmoins, étant donné qu'il ne semble pas y avoir d'essais de traction simple dans la littérature, le comportement en traction sera déduit des essais de flexion et ce malgré la remarque précédente.*

Le comportement en traction - compression est donc très dissymétrique, particulièrement à basse température. La contrainte à rupture en compression simple peut atteindre $\sigma_{rup}^{comp} \sim 1000\,[MPa]$ à température ambiante pour une contrainte à rupture de l'ordre de $\sigma_{rup}^{flex} \sim 100\,[MPa]$ en flexion (cf. respectivement **[Igata et Domoto 1973]** *et Fig. II.11-(a)). À plus haute température ($T > 1400\,[°C]$), il est généralement admis que le comportement en traction et compression devient ductile (cf Fig. II.11-(b) courbes avec « plateaux » terminés par des pointillés), c'est-à-dire que des niveaux de déformations élevés sont atteints sans pour autant que le matériau soit visiblement endommagé. L'augmentation de la température conduit par ailleurs à une diminution de la contrainte maximale dans l'éprouvette (cf. Fig. II.11-(b) courbes avec « plateaux » terminées par des pointillées de différents types). Un mécanisme de fluage engendré par le développement de dislocations dans les grains venant relaxer les contraintes est généralement associé à la ductilité du matériau* **[Canon et al. 1971]**. *La dissymétrie apparente du comportement du matériau en traction - compression tend à disparaître (cf. Fig. II.11(b) : domaine semi-fragile - courbes sans « plateau » versus domaine ductile - courbes avec « plateaux »). Les niveaux de contraintes atteints sont proches en compression et en traction.*

La loi phénoménologique « L3F » doit donc pouvoir rendre compte de cette disparité de comportement en fonction des conditions de chargements (vitesse de déformation et température). Outre les conditions de sollicitations qui impactent le comportement du matériau et peuvent le rendre dissymétrique, le profil de rupture n'est pas non plus le même. En compression, à basse température,



(a) Comportement (élasto-fragile exclusivement) dissymétrique de l'UO_2 qui s'accroît quand la température décroît. Domaine $T < 1200\,[°C]$.



(b) Comportement (semi-fragile → ductile) dissymétrique de l'UO_2 qui décroît quand la température s'accroît. Domaine $T > 1400\,[°C]$.

FIGURE II.11 – Schéma résumant le comportement de l'UO_2 en traction et compression en fonction du domaine de température considéré. **[Sercombe 2017]**

les fissures sont macroscopiques et se développent dans la direction de sollicitation. Elles traversent les grains et sont peu déviées par les joints de grains. Dans le domaine des hautes températures où la déformation irréversible cumulée est importante, des micros fissures apparaissent traduisant un endommagement prononcé des joints de grains. Ces fissures vont progresser dans la direction de sollicitation mais contrairement aux basses températures, celles-ci se développeront en suivant les joints de grains (propagation intergranulaire) et finiront par causer la rupture du matériau.

Le problème mécanique d'intérêt est décrit par le système d'équations Eq. II.7 ci-dessous. La loi phénoménologique « L3F » issue des travaux de thèse de **[Salvo 2014]** est basée sur la partition des déformations irréversibles. Cette loi phénoménologique doit pouvoir rendre compte des différentes corrélations obtenues lors des essais expérimentaux effectués sur pastilles combustibles vierges. Celle-ci doit notamment être sensible aux paramètres de premier ordre influençant la réponse macroscopique du matériau. Pour rappel les paramètres principaux sont la vitesse de déformation, la température et la variation de porosité.

$$
(\mathcal{P}) \begin{cases} div(\boldsymbol{\sigma}) = 0 & \text{dans V} \\ \boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{L} : \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{e}}(u) & \text{dans V} \quad \| \, \boldsymbol{L} \text{ Tenseur d'élasticité} \\ \boldsymbol{u} - \langle \varepsilon_{\mathsf{t}}(u) \rangle \cdot \boldsymbol{x} & \#\text{ sur } \partial V \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n} & \text{-}\#\text{ sur } \partial V \quad \| \, \boldsymbol{n} \text{ Normale sortante} \\ \langle \varepsilon_{\mathsf{t}}(u) \rangle = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathsf{t}} \end{cases}
$$

Avec :

$$
\begin{cases} \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{e}} = \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{t}} - \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{an}} \\ \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{an}} = \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{fiss}} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{frag}} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}} \\ \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{t}} \quad \text{Tenseur des déformations totales.} \\ \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{e}} \quad \text{Tenseur des déformations élastiques.} \\ \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{an}} \quad \text{Tenseur des déformations anélastiques.} \\ \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}} \quad \text{Tenseur des déformations visco-plastiques.} \\ \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{frag}} \quad \text{Tenseur des déformations de fragmentation.} \\ \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{fiss}} \quad \text{Tenseur des déformations de fissuration.} \end{cases} \tag{II.7}
$$

Et :

$$
\begin{cases} V \quad \text{Le volume du matériau considéré.} \quad [m]^3 \\ \boldsymbol{\sigma} \quad \text{Le tenseur des contraintes.} \quad [MPa] \\ \langle \cdot \rangle \quad \text{L'opérateur moyenne.} \end{cases}
$$

Avec :

$$
\langle \cdot \rangle = \frac{1}{|V|} \int_V \cdot \, \mathrm{d}V
$$

Cette loi comprend un terme de fissuration repris par le modèle DDIF2 ($\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{fiss}}$), un terme d'endommagement des joints de grains traduit par le critère de Drüker-Prager ($\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{frag}}$) et un terme de fluage($\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}$). La partie fluage ($\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}$) comprend le fluage thermique ($\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathsf{th}}_{\mathsf{vp}}$) de la pastille ainsi que celui induit par l'irradiation ($\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathsf{irr}}_{\mathsf{vp}}$). Les différentes composantes des déformations seront abordées plus en détail dans la suite avec en premier lieu le modèle de fissuration DDIF2, le critère d'endommagement des joints de grains de Drücker-Prager puis le terme de fluage thermique (le fluage induit par l'irradiation ne sera pas décrit car celui-ci est négligeable en condition de RIA : la durée du pulse est trop courte). Le lien avec la variation de porosité sera explicité selon le cas en question.

Tout d'abord, le modèle DDIF2 repris par le premier terme des déformations ($\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{fiss}}$) de Eq. II.7 traduit les fissurations macroscopiques en traction : par exemple les fissures radiales secondaires observées lors des essais REP-Na présentés précédemment (cf. partie I.3.2). Ce modèle traduit le comportement élasto-fragile du combustible UO_2 en traction. Une contrainte seuil macroscopique constante de fissuration (σ_R) est définie. Cette contrainte de fissuration macroscopique ne dépend pas des conditions de sollicitations, c'est-à-dire qu'elle ne dépend pas de la vitesse de déformation et de la température. Lorsque la contrainte dépasse cette valeur seuil de fissuration, le matériau s'endommage. Cela se traduit par une déformation inélastique de fissuration avec adoucissement du comportement (module d'écrouissage négatif) jusqu'à annulation de la contrainte macroscopique à partir d'une déformation critique fonction de la taille de l'élément fini endommagé (régularisation de l'approche locale). Ce modèle est défini à partir de la fonctionnelle et des coefficients décrits via Eq. II.8.

Modèle de Fissuration macroscopique en traction DDIF2 :

$$r_i(\sigma_i) = \sigma_i - \sigma_R - R_i^P max(\varepsilon^i_{\mathsf{fiss}}, \varepsilon^i_{\mathsf{fissM}})$$

$i = (r, \theta, z)$	La direction de sollicitation
σ_i	Contrainte dans la direction i $[Pa]$
σ_R	Contrainte seuil de fissuration macroscopique $[Pa]$
R_i^P	Module d'adoucissement dans la direction i $[Pa]$ $\equiv$ Pente de décroissance de la courbe $\sigma = f(\varepsilon)$ lorsque $\sigma_i > \sigma_R$
$\varepsilon^i_{\mathsf{fiss}}$	Déformation de fissuration dans la direction i
$\varepsilon^i_{\mathsf{fissM}}$	Déformation d'endommagement de fissuration maximale atteinte lors du chargement dans la direction i

(II.8)

$$\text{Avec : } \dot{\varepsilon}^i_{\mathsf{fiss}} \begin{cases} \dot{\varepsilon}^i_{\mathsf{fiss}} = \dot{\lambda}\dfrac{\partial r_i(\sigma_i)}{\partial \sigma} & \text{si } r_i(\sigma_i) = 0 \\ \dot{\varepsilon}^i_{\mathsf{fiss}} = 0 & \text{si } r_i(\sigma_i) < 0 \end{cases}$$

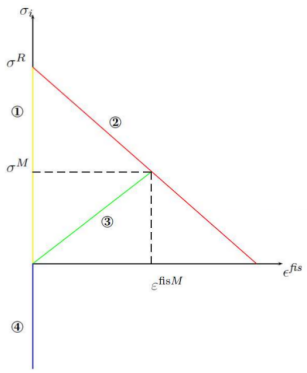
$\dot{\lambda}$	Un multiplicateur plastique

$$\text{Et : } R_i^P = \frac{\sigma_R^2 l_i}{2G}$$

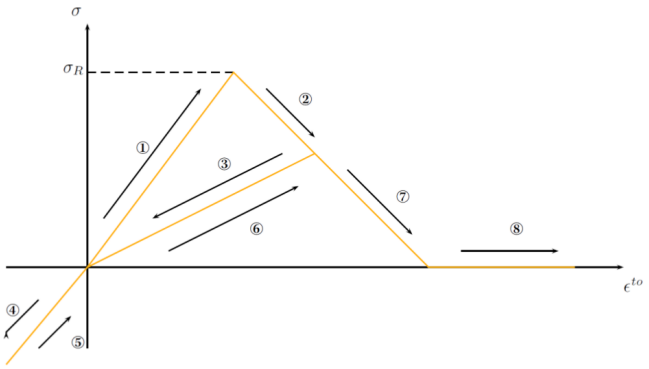
l_i	La longueur de maille dans la direction i	$[m]$
G	La ténacité ou l'énergie de fissuration	$[J].[m]^{-2}$

Où :	$l < 100$	$[\mu m]$
	$G = 10$	$[J].[m]^{-2}$
	$\sigma_R = 136$	$[MPa]$

Il est à rappeler que l'endommagement en traction peut se faire uniquement selon les trois directions principales à savoir le triplet (e_r, e_θ, e_z). Dans le détail, en s'appuyant sur les figures Fig. II.12a et Fig. II.12b, le modèle peut être décrit à travers plusieurs étapes : cf. Fig. II.12b trajet de sollici-



(a) Schéma des états d'équilibre dans le plan « contrainte-déformation d'endommagement » caractérisant la loi de comportement DDIF2.



(b) Schéma de la courbe des contraintes en fonction des déformations sur un certain trajet de sollicitation pour le modèle de fissuration DDIF2(1D).

FIGURE II.12 – Illustration du modèle DDIF2 et de certains de ses paramètres. [**Salvo 2014**]

tation (mise en traction uniaxée (1) et (2) , décharge après un certain endommagement de celui-ci (3), mise en compression uniaxée (4), décharge (5), mise en traction uniaxée jusqu'à rupture (6), (7) et (8)).

Initialement l'état de contrainte et de déformation est nul. Lors du premier chargement (étape 1 représentée Fig. II.12a-Fig. II.12b), la contrainte augmente jusqu'à la contrainte seuil de fissuration macroscopique. Une fois la contrainte seuil de fissuration atteinte, le matériau s'endommage selon une certaine pente d'adoucissement (étape 2 Fig. II.12a-Fig. II.12b). À partir d'une certaine déformation de fissuration ($\varepsilon_{\text{fissM}}$, contrainte correspondante σ^M) et ce avant la rupture, le matériau est déchargé (étape 3 Fig. II.12a-Fig. II.12b). Lors de cette étape, la déformation inélastique de fissuration obtenue ($\varepsilon_{\text{fissM}}$) a engendré une diminution de la contrainte qui par rétroaction se traduit par une diminution du module d'Young. La valeur de celui-ci est donc corrigée en conséquence mais uniquement dans le cas d'une nouvelle mise en traction du matériau. Après être revenu à contrainte nulle, le matériau est successivement mis en compression puis de nouveau en traction à travers les étapes 4-5-6-7 et 8. Lorsque le matériau est en compression après avoir été endommagé en traction (étape 1-2-3 Fig. II.12a-Fig. II.12b), le module d'Young obtenu sur la compression est le même qu'initialement (sans endommagement). C'est-à-dire que le matériau, endommagé en traction par le modèle DDIF2 et sollicité en compression, referme ses fissures et guérit mécaniquement : il retrouve les mêmes capacités mécaniques qu'initialement. Ceci s'explique par le fait que la déformation inélastique ($\boldsymbol{\varepsilon}_{\text{fiss}}$) porte uniquement sur l'endommagement et la fissuration en traction au sein du modèle DDIF2. Les coefficients mécaniques ne sont donc pas directement modifiés lors de la mise en compression du matériau. Lors de la nouvelle mise en traction (étape 6) le module d'Young obtenu est bien le module d'Young endommagé obtenu précédemment (étape 3), cela est traduit dans la fonctionnelle par la présence du terme $max(\varepsilon^i_{\text{fiss}}, \varepsilon^i_{\text{fissM}})$ de l'équation Eq. II.8 qui garde en mémoire la fissuration inélastique maximale vue par le matériau. Une fois la nouvelle contrainte seuil atteinte ($\sigma^M = \sigma_R - R_i^P max(\varepsilon^i_{\text{fiss}}, \varepsilon^i_{\text{fissM}})$ Eq. II.8), le matériau continue de s'endommager jusqu'à annulation de la contrainte macroscopique à partir d'une certaine déformation critique fonction de la taille de l'élément fini endommagé. Le matériau est fissuré.

L'activation du modèle DDIF2 impliquera une rupture fragile du matériau. L'endommagement sera initiateur de fissures macroscopiques, fissures qui traverseront les grains sans être perturbées par les joints de grains. Les fissures se développeront orthogonalement à la direction de sollicitation car le modèle DDIF2 ne peut être activé qu'en traction.

Le critère de Drücker-Prager reprend le deuxième terme $\boldsymbol{\varepsilon}_{\text{frag}}$ de la loi « L3F » (cf. Eq. II.7). Il traduit l'endommagement plastique des joints de grains. En compression, seul le critère de Drücker-Prager peut induire de l'endommagement au sein du matériau et ce compte tenu de ce que nous venons de dire dans la partie précédente sur le modèle DDIF2. En traction, ce critère ainsi que le

modèle DDIF2 sont en compétition. Néanmoins à une condition de sollicitation donnée, seul un des deux phénomènes sera activé lors d'une sollicitation en traction. C'est pourquoi une dissymétrie de comportement peut être observée entre la traction et la compression lorsque cette loi L3F est utilisée et ceci en fonction des conditions de sollicitations (vitesse de déformation et température). Ce critère de Drücker-Prager est défini par la fonctionnelle et le système d'équations ci-dessous Eq. II.9.

Critère de Drücker- Prager en compression et en traction :

$$g(\boldsymbol{\sigma}) = h\sigma_m + \sigma_{eq} - R$$

$$\left|\begin{array}{l} \sigma_{eq} = \sqrt{\dfrac{3}{2}\boldsymbol{s} : \boldsymbol{s}} \\ \sigma_m = \dfrac{1}{3}\,\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{Id} \\ \\ h = \dfrac{3(1-\tau)}{\tau+1} \\ R = \dfrac{2\,\tau\,\sigma_c(T)}{\tau+1} \end{array}\right.$$

$$\text{Avec : } \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^P \begin{cases} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^P = \dot{\lambda}\dfrac{\partial g(\boldsymbol{\sigma})}{\partial \boldsymbol{\sigma}} & \text{si } g(\boldsymbol{\sigma}) = 0 \\ \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^P = 0 & \text{si } g(\boldsymbol{\sigma}) < 0 \end{cases}$$

$\dot{\lambda}$ Un multiplicateur plastique

(II.9)

	$\tau = \dfrac{\sigma_t(T)}{\sigma_c(T)} (= 0.9)$	Rapport des seuils de fragment--ation (fixé) en traction et compress--ion en utilisant la contrainte au centre.	
	$\sigma_c(T) = e^{4.10^{-7}T^2 - 2.55.10^{-3}T + 8}$	Contrainte d'écoulement en compress--ion au centre dépendante de la température.	$[MPa]$
Et :	h	Paramètre constant.	$[-]$
	R	Paramètre variable.	$[MPa]$
	σ_{eq}	Contrainte équivalente de Von Mises.	$[MPa]$
	σ_m	Premier invariant du tenseur des contraintes.	$[MPa]$
	T	Température	$[K]$
	$\boldsymbol{s}$	Le tenseur des contraintes déviatorique.	$[MPa]$

Lorsque la valeur seuil de fragmentation en contrainte (ou contrainte d'écoulement de fragmentation) est atteinte, une déformation plastique est engendrée. Celle-ci induit une variation de la porosité explicitée au sein de Eq. II.10. Cette variation est positive car elle traduit la « dilatation » des joints de grains via les phénomènes de nucléations, croissances des cavités puis coalescences pour former des micros fissures et dans un dernier temps, des fissures.

$$\begin{aligned} \dot{f} &= (1-f)\dot{\varepsilon}^P : Id \\ &= (1-f) \times h \geq 0 \end{aligned} \tag{II.10}$$

Il est à noter que ce n'est qu'un critère. **À ce titre, l'endommagement n'est pas explicité en fonction de la déformation plastique (ε^P)**. Le rapport du seuil de fragmentations en traction sur celui en compression (τ, voir Eq. II.9) est pris constant ($\tau = 0.9$). Le choix a été fait d'imposer la contrainte d'écoulement de fragmentation en traction plus basse que la contrainte d'écoulement

de fragmentation en compression. La contrainte d'écoulement de fragmentation en compression est dépendante de la température. Le rapport des seuils (τ) étant constant, la contrainte d'écoulement de fragmentation en traction est proportionnellement dépendante à la contrainte d'écoulement de fragmentation en compression.

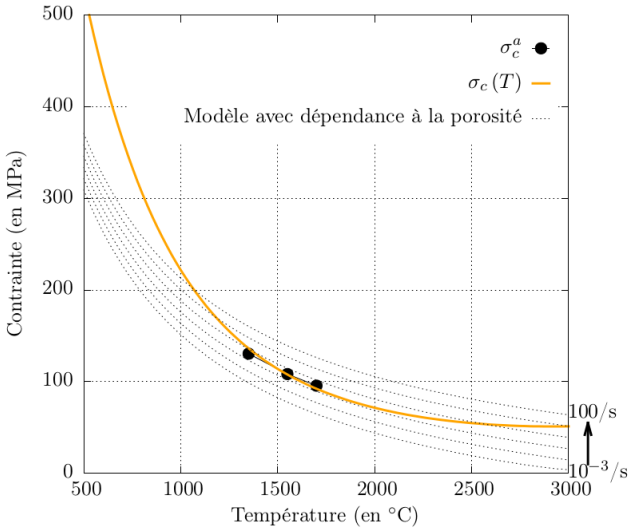


FIGURE II.13 – Graphique représentant la contrainte d'écoulement de fragmentation en compression au centre de l'échantillon en fonction de la température et ceci à plusieurs vitesses de déformations.

La figure Fig. II.13 représente la contrainte d'écoulement de fragmentation en compression en fonction de la température. Ce tracé est issu de l'équation phénoménologique présentée dans Eq. II.9 où la contrainte, correspondant à une déformation $\bar{\varepsilon} = 2\,[\%]$, a été mesurée en fonction de la température et de la vitesse de déformation. En s'appuyant directement sur Fig. II.13, la contrainte d'écoulement de fragmentation en compression diminue lorsque la température augmente. La contrainte seuil de fragmentation est donc dépendante des conditions de sollicitations que cela soit en traction ou en compression.

Enfin, le fluage thermique ($\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}^{\mathsf{th}}$ cf.Eq. II.7) est activé en conditions incidentelles, transitoires de classes 1 ou 2, ou en conditions accidentelles (de type RIA par exemple). Ce fluage thermique est défini par le potentiel de dissipation décrit ci-dessous Eq. II.11.

$$\Psi^{\mathsf{th}}_{\mathsf{vp}}(\sigma_m, \sigma_{eq}, f) = \sigma_0\, K\, e^{-(\frac{Q}{RT})}\, cosh(\frac{\Sigma}{\sigma_0})$$

$$\left| \Sigma = \sqrt{\alpha(f)\sigma_m^2 + \beta(f)\sigma_{eq}^2} \right.$$

Où : $\left\{ \begin{array}{l} \alpha(f) = \dfrac{9}{4}\dfrac{A(f)}{B(f)}\beta(f) \quad \textbf{[Monerie et Gatt 2006]} \\ \beta(f) = B(f) \end{array} \right.$

Et : $\left\{ \begin{array}{l} A(f) = [n(f^{-\frac{1}{n}} - 1)]^{-\frac{2n}{n+1}} \\ B(f) = (1 + \dfrac{2}{3}f)(1-f)^{-\frac{2n}{n+1}} \quad \textbf{[Michel et Suquet 1992]} \\ n = 6 \end{array} \right.$

$$\left| \begin{array}{l} K = K_0\, e^{-(\frac{\gamma}{max(d;6)-d_0})} \\ \sigma_{eq} = \sqrt{\dfrac{3}{2}\boldsymbol{s} : \boldsymbol{s}} \\ \sigma_m = \dfrac{1}{3}\,\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{Id} \end{array} \right. \tag{II.11}$$

Et :

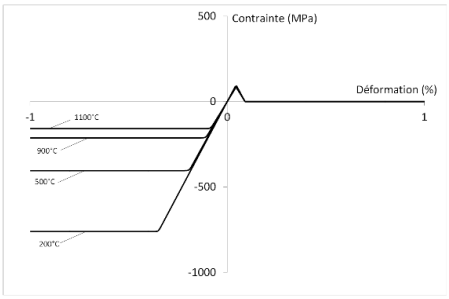
$Q = max(482; 876 - \frac{T}{4.16})$	L'énegie d'activation du fluage.	$[kJ].[mol]^{-1}$
$K_0 = 77400$	Paramètre constant.	$[s]^{-1}$
$d_0 = 4.6$	Taille de grain de référence.	$[\mu m]$
d	Taille de grain.	$[\mu m]$
$\gamma = 5.277$	Paramètre constant.	$[\mu m]$
T	Température.	$[K]$
R	Constante gaz parfaits.	$[kJ].[mol]^{-1}.[K]^{-1}$
σ_{eq}	Contrainte équivalente de Von Mises.	$[MPa]$
σ_m	Premier invariant du tenseur des contraintes.	$[MPa]$
f	Fraction volumique de porosité.	$[-]$
$\sigma_0 = \left\{ \begin{array}{l} 4.7 \\ 6.0 \end{array} \right.$	Si faible densité $[MPa]$ Si forte densité $[MPa]$	
$\boldsymbol{s}$	Le tenseur des contraintes déviatorique.	$[MPa]$

Suite aux essais expérimentaux sur le lot faible densité, un phénomène de densification a pu être observé. Afin de rendre compte de ce phénomène, la compressibilité des pores a été prise en compte en utilisant les travaux de [**Monerie et Gatt 2006**], ainsi que de [**Michel et Suquet 1992**]. La variation de la porosité induite par la déformation issue du fluage thermique ($\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathsf{th}}_{\mathsf{vp}}$) est définie par l'équation Eq. II.12 ci-dessous.

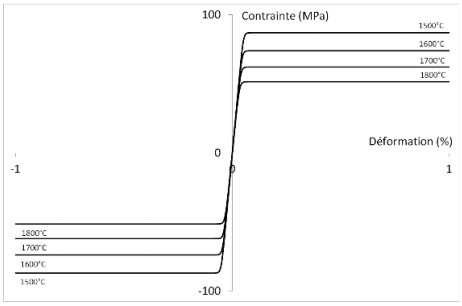
$$\begin{aligned} \dot{f} &= (1-f)\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathsf{th}}_{\mathsf{vp}} : \boldsymbol{Id} \\ &= (1-f) \times K\, e^{-(\frac{Q}{RT})}\, sinh(\frac{\Sigma}{\sigma_0})\, \alpha(f)\, \frac{\sigma_m}{\Sigma} \end{aligned} \tag{II.12}$$

II.1.4.2 Application au code de calcul numérique ALCYONE [Sercombe 2017]

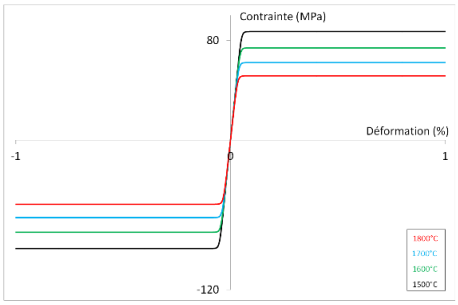
Le code de calcul numérique ALCYONE [**Sercombe 2017**] (code développé par le CEA et simulant le comportement thermomécanique du crayon combustible en conditions normale, incidentelle et accidentelle) utilise cette loi de comportement comme illustré par la figure Fig. II.14 où la contrainte



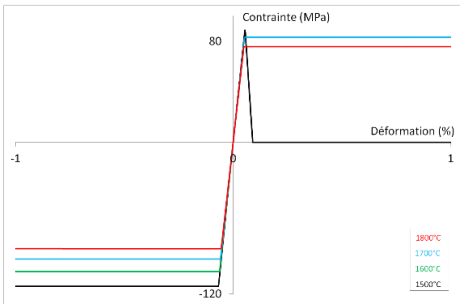
(a) Domaine de température « modérée » : $T \leqslant 1200\,[°C]$.



(b) Domaine de température « forte » : $T \geqslant 1400\,[°C]$.



(c) Faible vitesse de déformation : $\dot{\bar{\varepsilon}} = 10^{-5}\,[s]^{-1}$.



(d) Forte vitesse de déformation : $\dot{\bar{\varepsilon}} = 10^{-1}\,[s]^{-1}$.

FIGURE II.14 – Graphiques représentant la contrainte en fonction de la déformation issue de la loi « L3F » et ceci pour des gammes de températures et vitesses de déformation différentes.
Avec la convention que le matériau est en compression pour des contraintes négatives.

a été tracée en fonction de la déformation et ceci tout en faisant varier la température et la vitesse de déformation. Dans le code de calcul numérique, le choix a été fait de ne pas prendre en compte la compressibilité des pores par le fluage thermique. Cette partie-là est donc incompressible. La variation de porosité est donc uniquement attribuable à la déformation plastique issue du critère de Drücker-Prager. Cette déformation plastique traduit indirectement l'endommagement des joints de grains, endommagement qui n'est pas quantifié. À partir d'un seuil en déformation plastique cumulée, les gaz piégés aux joints de grains et issus de l'irradiation de base seront relâchés. En d'autres termes, l'endommagement des joints de grains est à relier à la déformation plastique du critère de Drücker-Prager. Le matériau et ici en particulier les joints de grains, sont considérés suffisamment endommagés pour que le gaz puisse s'échapper dans les volumes libres du crayon combustible.

Il est à remarquer, une nouvelle fois, qu'à basse température (Fig. II.14a) le comportement entre la traction et la compression est dissymétrique. Expérimentalement, la contrainte à rupture en compression est variable et fortement dépendante de la température ($\sim 1000\,[MPa]$ à température ambiante) alors qu'en flexion la contrainte à rupture macroscopique est constante ($\sim 100\,[MPa]$). La contrainte de rupture de fissuration du modèle DDIF2 reprend la contrainte de rupture macroscopique obtenue sur les essais de flexion. Elle est donc naturellement bien plus faible que la contrainte d'écoulement de fragmentation du critère de Drücker-Prager. Lorsque la température augmente (Fig. II.14a), les propriétés mécaniques diminuent. En particulier la contrainte seuil d'entrée en plasticité du critère de Drücker-Prager diminue. Ceci tend à symétriser le comportement de la pastille combustible UO_2. Lorsque la température, comme illustré par la figure Fig. II.14b, est suffisamment élevée ($1400 < T\,[°C]$), la contrainte seuil de fragmentation diminue et devient plus petite que la contrainte de fissuration macroscopique du modèle DDIF2 qui elle est constante. Le comportement est complè-

tement symétrique au coefficient de rapport des seuils de fragmentation (τ Eq. II.9) prêt. Au-delà de l'impact de la température, la vitesse de déformation joue aussi un rôle dans la réponse de la loi « L3F ». Dans le domaine des hautes températures ($1400 < T\,[°C]$, Fig. II.14b), le comportement peut devenir dissymétrique suivant la vitesse de déformation imposée. Expérimentalement, lorsque la vitesse de déformation augmente, les propriétés mécaniques augmentent et notamment la contrainte seuil d'écoulement du critère de Drücker-Prager. Cette dernière peut devenir plus importante que la contrainte de rupture associée au modèle de fissuration DDIF2, si la vitesse de déformation est suffisamment élevée et ce même si la température est relativement élevée. Comme en témoigne la comparaison des figures Fig. II.14c et Fig. II.14d, à température fixe, l'augmentation de la vitesse de déformation (rapport 10^4) fait basculer la contrainte seuil de fragmentation au-dessus de la contrainte seuil de fissuration pour certaines températures ($T = 1500,\ 1600\,[°C]$). Le comportement est de nouveau dissymétrique. Attention la prise en compte de l'impact de la vitesse de déformation est à relier aux travaux de [**Sercombe 2017**].

II.1.4.3 Synthèse de la loi phénoménologique « L3F » [Salvo 2014] et de son application dans ALCYONE [Sercombe 2017]

Cette loi phénoménologique est aboutie d'un point de vue macroscopique dans le sens où elle est sensible à la température (et à la vitesse de déformation si la loi est issue de [**Sercombe 2017**]). La loi retrouve bien les contraintes d'écoulement issues de l'expérimental et ce pour toute la gamme de température et de vitesse de déformation balayée dans les essais expérimentaux effectués dans les travaux de thèse de [**Salvo 2014**]. Le critère de Drücker-Prager pouvant être activé à la fois en traction et en compression permet d'attester ou non de l'endommagement des joints de grains. Cette loi peut également prendre en compte la fissuration macroscopique dans les zones de la pastille qui seraient en traction. Les inconvénients sont qu'il n'y a pas de lien entre l'endommagement en traction généré par le modèle DDIF2 et l'endommagement en compression pris en compte via le critère de Drücker-Prager. Les pentes d'écrouissage issues des essais expérimentaux ne sont pas retrouvées avec la loi phénoménologique « L3F » [**Salvo 2014**]. **Cette loi reste macroscopique, elle demande certes peu de temps de calcul, cependant elle ne permet pas d'avoir accès aux champs locaux (contraintes et déformations) au sein du polycristal UO_2. Il est difficile de savoir si elle sous-estime ou surestime l'endommagement des joints de grains. En effet, si le point de vue adopté est un polycristal constitué d'une centaine de grains, la contrainte obtenue par cette loi est la contrainte effective du polycristal. Il se peut que la contrainte soit supérieure localement à cette contrainte effective. Dans ce cas là, la contrainte seuil (contrainte d'écoulement de fissuration issue du critère de Drücker-Prager ou contrainte de fragmentation macroscopique issue du modèle DDIF2) est atteinte localement avant que la contrainte effective n'atteigne la valeur seuil. Enfin cette approche ne permet pas d'avoir accès aux tailles des différents fragments générés lors d'un accident de type RIA.**

En résumé, cette approche macroscopique qualifiée de phénoménologique, ne permet pas d'avoir accès aux champs locaux de contraintes et déformations. Elle ne permet pas de rendre compte du faciès de fissurations et de la taille des fragments de combustible engendrée par la propagation des fissures. En d'autres termes et avec cette loi « L3F », il est possible de savoir où radialement le combustible s'endommage, mais il est néanmoins impossible de connaître les dimensions des fragments.

Il faut descendre d'une échelle et utiliser une approche micro mécanique pour obtenir les caractéristiques mentionnées ci dessus. Cette approche est explicitée dans la suite de ce chapitre. Tout d'abord, une étude bibliographique des essais sur des monocristaux d'UO_2 sera présentée. Il s'en suivra une étude de l'approche micro mécanique à champ complet développée dans les travaux de [**Portelette 2018**], placée dans la continuité des travaux de [**Pacull 2011 ; Soulacroix 2014**], permettant de fournir quelques unes des caractéristiques souhaitées.

II.2 Essais expérimentaux sur monocristaux d'UO_2 et une approche à champ complet développée

Le dioxyde d'uranium (UO_2) a une structure cristalline cubique face centrée du type fluorine (CaF_2), comme illustré Fig. II.15. Le paramètre de maille a est de l'ordre de $a \sim 5.4704\,[\mathring{A}]$ ou de $a \sim 5.4682\,[\mathring{A}]$ [**Rapperport et Huntress 1960**].

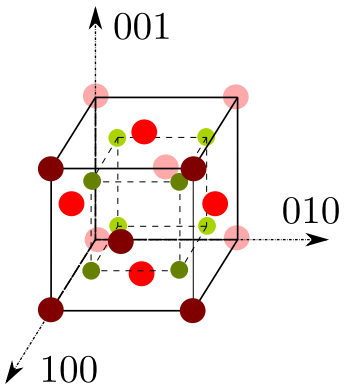


FIGURE II.15 – Représentation de la structure cristalline Cubique Face Centrée du dioxyde d'uranium. La couleur représente les atomes d'un même plan parallèle au plan de normale (100). En rouge (clair-foncé) les atomes d'uranium et en vert (clair-foncé) les atomes d'oxygène.

Il existe trois familles de glissement différentes ({100}, {110}, {111}) qui regroupent les 24 systèmes de glissement de cette structure. Une partie des 24 systèmes est illustrée Fig. II.16. Le vecteur de Burgers identifié par les différents auteurs est $\overrightarrow{b} = \frac{a}{2} < 110 >$. La sollicitation des différents systèmes (et par extension familles), peut dépendre de plusieurs paramètres comme l'orientation de l'axe de compression, la déviation à la stoechiométrie, la température... Afin de pouvoir activer un système de glissement, une contrainte seuil doit être franchie, c'est la contrainte résolue de cisaillement critique. Cette contrainte résolue de cisaillement critique est la projection de la contrainte imposée dans l'essai sur le plan de glissement considéré. Pour un essai unitaire, cette projection s'effectue à l'aide du coefficient de projection appelé facteur de Schmid et est défini grâce à deux angles. Enfin le plan de contrainte résolue de cisaillement maximale est le plan qui a une contrainte maximale après projection.

II.2.1 Essais expérimentaux à l'échelle du monocristal

II.2.1.1 Références analysées

L'enjeu de la partie qui va suivre est de s'affranchir de l'effet des joints de grains sur la réponse mécanique afin d'identifier la contrainte résolue de cisaillement critique des différentes familles en fonction de la température, de la déviation à la stoechiométrie et d'autres paramètres si nécessaire. Ceci permettra de prévoir quelles familles (et en particulier les systèmes) s'activent suivant la direction de l'axe de compression envisagé.

Afin d'étudier le comportement du dioxyde d'uranium UO_2 sur des essais de compression sur monocristaux, les articles de [**Rapperport et Huntress 1960**], [**Armstrong et al. 1966**], [**Byron 1968a**], [**Nadeau 1969**], [**Yust et McHargue 1969**], [**Sawbridge et Sykes 1971**], [**Yust et McHargue 1971**], [**Seltzer et al. 1972b**], [**Yust et McHargue 1973**], [**Mordike 1976**], [**Alamo et al. 1978**], [**Ashbee et Yust 1982**], [**Keller et al. 1988a**], [**Keller et al. 1988b**], [**Frazer et Hosemann 2019**] ont été étudiés.

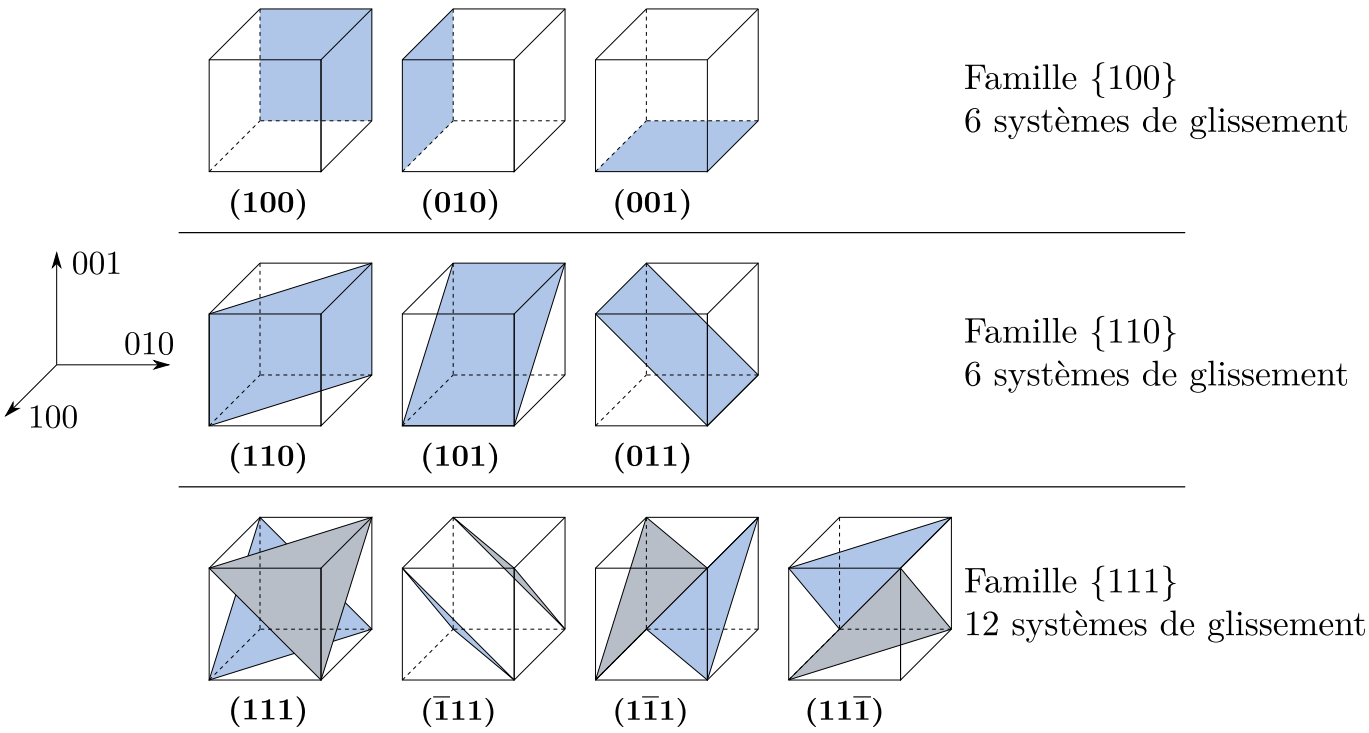


FIGURE II.16 – Familles et systèmes de glissements associés pour le dioxyde d'uranium. Entre parenthèses, la normale qui définit le plan de glissement.

Quelques particularités sur les articles étudiés sont à noter. Tout d'abord les auteurs n'étudient que très peu l'impact de la vitesse de déformation. Cette dernière est souvent de l'ordre de $\dot{\bar{\varepsilon}} < 10^{-3}\,[s]^{-1}$, bien inférieure (facteur 100 au moins) aux vitesses de déformations atteintes lors d'un accident d'injection de réactivité. D'autre part, uniquement [**Armstrong et al. 1966**] effectuent des essais de fluage en flexion 4 points, et [**Seltzer et al. 1972b**] effectuent des essais de fluage sur monocristaux. Pour ce qui est de l'étude de [**Frazer et Hosemann 2019**], ces derniers effectuent des essais de compression sur micro piliers, piliers qui ne sont pas représentatifs du monocristal. Les autres auteurs effectuent des essais de compression sur monocristaux à vitesse de déplacement, et donc de déformation, imposée. Dans la partie suivante, les auteurs sont traités avec les autres, malgré cette différence dans les essais expérimentaux. Enfin, il est parfois difficile de comparer certaines études de par le manque de données fournies par les auteurs comme la déviation à la stoechiométrie et la vitesse de déformation.

II.2.1.2 Synthèse du comportement monocristallin en compression

Pour un matériau stoechiométrique, il apparaît que la contrainte résolue de cisaillement critique de la famille {100} (cf. Fig. III.5) est inférieure, et ce de manière non négligeable, à celles des familles {110} (cf. Fig. III.6) et {111}. Il est difficile d'avoir un avis entre la contrainte résolue de cisaillement critique de la famille {110} et celle de la famille {111}. En effet cette dernière famille n'est jamais observée seule, et les traces de glissement relevées sur cette dernière sembleraient provenir de glissement dévié des deux premières familles. **Néanmoins** [**Mordike 1976 ; Byron 1968a**] **ont menés les même expériences et ne relèvent l'activation que des systèmes appartenant aux familles** {100} **et** {110}**.** Ces orientations sont plus ou moins utilisées par [**Sawbridge et Sykes 1971**] qui lui observe de l'activité sur la famille {111}. [**Seltzer et al. 1972b**] permettent d'expliquer cette différence d'observation. En effet ces derniers mentionnent que les échantillons de [**Sawbridge et Sykes 1971**] pourraient être légèrement sur stochiométriques favorisant ainsi le glissement sur les systèmes de la famille {111}. Ceci est confirmé par [**Alamo et al. 1978**], avec des échantillons légèrement sous stoechiométriques, qui observent les mêmes caractéristiques que

[**Sawbridge et Sykes 1971**]. En se référant aux données de [**Byron 1968a ; Mordike 1976**] il apparaît donc que la contrainte résolue de cisaillement critique de la famille {110} semblerait, pour un matériau stoechiométrique, inférieure à celle de la famille {111} car cette première est observée seule. Il est difficile de dire si la différence est significative ou non. **Outre cette comparaison des contraintes résolues de cisaillement critique, ces dernières diminuent lorsque la température augmente. La décroissance semblerait similaire pour la contrainte résolue de cisaillement critique des familles** {100} **et** {110}**. De la même manière, [Byron 1968a ; Mordike 1976] n'observent que l'activité des plans des familles** {100} **et** {110} **et ce sur toute la gamme de température balayée** $T \in [600, 1800]\,[°C]$**. En se basant sur ces deux travaux, la décroissance de la contrainte résolue de cisaillement critique de la famille** {111}**, pour un matériau stoechiométrique, ne devrait pas être inférieure à celle de la famille** {110} **sur la gamme de température considérée.**

La déviation à la stoechiométrie joue un rôle prépondérant dans la réponse du monocristal. Ceci pose la question de quelle est la déviation de transition à partir de laquelle le matériau n'est plus stoechiométrique. Cette déviation, même minime*, impacte fortement les contraintes résolues de cisaillement critiques des différentes familles. Celle issue de la famille {100} est indépendante de la déviation ou ne diminue que très peu lorsque la déviation augmente. Pour les contraintes résolues de cisaillement critiques des familles {110} et {111}, ces dernières diminuent fortement lorsque la déviation augmente. Étant donné que [**Sawbridge et Sykes 1971**] observent du glissement sur les plans de la famille {111}, la diminution de la contrainte résolue de cisaillement critique sur cette famille doit être plus conséquente que la diminution de celle de la famille {110}. La déviation à la stoechiométrie tend à rendre le glissement isotrope et ne pas privilégier une famille en particulier, mais plutôt le système de glissement présentant le facteur de Schmid le plus important.

Dans le domaine des basses températures, [**Frazer et Hosemann 2019 ; Keller et al. 1988a**] obtiennent une température de transition fragile ductile comprise dans le domaine $T_c \in [0.1, 0.17] \times T_m$ (avec T_m la température de fusion du dioxyde d'uranium). **Le mécanisme induisant la déformation n'est pas clair. [Frazer et Hosemann 2019] pencheraient pour un mécanisme de Peierls. Ils calculent la contrainte de Peierls et par extension sembleraient penser a minima que ce mécanisme contribue fortement à la déformation dans ce domaine. [Keller et al. 1988a]** quant à eux invoquent une interaction des lignes de dislocations mobile avec les obstacles. Les obstacles sont vraisemblablement des impuretés de fabrications anionique [**Lefebvre 1977**].

Dans le domaine des hautes températures, [**Keller et al. 1988b**] n'observent plus le pic de contrainte. Les courbes de contraintes déformations dépendent de l'orientation de l'axe de compression et de la température. **Passée une certaine température, l'écrouissage semble ne plus être présent. Pour ce qui est du mécanisme induisant la déformation visco-plastique, ce n'est pas clair du tout.** Au vu des différents mécanismes invoqués il semblerait qu'il y en ait plusieurs qui participent activement à la déformation. Il est également étonnant de voir que la déviation à la stœchiométrie impacte fortement la CRSS des familles {110}, {111} et qu'elle n'impacte pas ou très peu celle de la famille {100}. Certains auteurs, comme [**Seltzer et al. 1972b**], suggèrent que le mécanisme dépend de la famille considérée. Les mécanismes souvent invoqués sont le glissement dévié (cité par tous les auteurs ou presque), la montée de dislocations [**Keller et al. 1988b**], l'interaction des lignes de dislocations entre elles, l'interaction des lignes de dislocations avec les obstacles (impuretés ou autres) [**Lefebvre 1977 ; Sawbridge et Sykes 1971 ; Keller et al. 1988b**] et enfin le franchissement de la barrière de Peierls [**Frazer et Hosemann 2019 ; Nadeau 1969**].

En conclusion, plusieurs mécanismes sembleraient participer à la déformation. Le mécanisme participant majoritairement à cette dernière doit dépendre de certains paramètres, comme la concentration d'impuretés, le type d'impuretés, la température, la déviation à la stœchiométrie.

∗. Selon [**Keller et al. 1988b**], la déviation de transition semblerait être de l'ordre de $x \in [10^{-4}, 10^{-3}]\,[-]$.

II.2.2 Approche micromécanique en champ complet type FEM issue des travaux de thèse de [Pacull 2011 ; Soulacroix 2014 ; Portelette 2018]

Les travaux de thèse de [**Portelette 2018**] s'inscrivent dans la continuité des travaux de thèses de [**Pacull 2011 ; Soulacroix 2014**]. À l'instar de l'approche adoptée par [**Salvo 2014**] dans ses travaux de thèse, ces derniers descendent d'une échelle. En se basant sur les travaux expérimentaux effectués à l'échelle monocristalline (cf. partie précédente), ils essaient de rendre compte tout d'abord du comportement du dioxyde d'uranium à l'échelle du monocristal. Ils remontent ensuite d'une échelle, en intégrant l'impact des joints de grains, pour obtenir le comportement du dioxyde d'uranium à l'échelle du polycristal. Cette méthode, bien plus coûteuse en temps de calcul qu'une loi de comportement phénoménologique (exemple loi « L3F » présentée cf. II.1.3), permet l'accès aux champs locaux (déformations et contraintes). Comme cela a été mentionné précédemment, les auteurs ayant travaillé expérimentalement sur les monocristaux sont loin d'être d'accord sur le ou les mécanismes induisant la déformation visco-plastique. Le choix a été fait par [**Pacull 2011**] puis [**Soulacroix 2014**] et enfin [**Portelette 2018**] de retenir le mécanisme de glissement des lignes de dislocations franchissant la barrière de Peierls. Ce mécanisme a été cité par [**Nadeau 1969**]. [**Tachibana et al. 1976**] pour l'aspect polycristallin l'invoquent également dans le cas de fortes vitesses de déformation, vitesses de déformation qui se rapprochent des conditions accidentelles d'insertion de réactivité.

Le problème mécanique d'intérêt est décrit par le système d'équations Eq. II.13 ci-dessous. La déformation est entièrement supportée par le glissement des lignes de dislocations. L'indice s de l'équation Eq. II.13, reprend le système de glissement. Comme mentionné dans l'étude du comportement monocristallin, le dioxyde d'uranium possède 24 systèmes de glissements répartis dans 3 familles ($\{100\}$, $\{110\}$ et $\{111\}$) comme illustré Fig. II.16.

$$
(\mathcal{P}) \begin{cases} div(\boldsymbol{\sigma}) = 0 & \text{dans V} & \\ \boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{L} : \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{e}}(u) & \text{dans V} & \| \, \boldsymbol{L} \text{ Tenseur d'élasticité} \\ \boldsymbol{u} - \langle \varepsilon_{\mathsf{t}}(u) \rangle \cdot \boldsymbol{x} & \# \text{ sur } \partial V & \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n} & \text{-}\# \text{ sur } \partial V & \| \, \boldsymbol{n} \text{ Normale sortante} \\ \langle \varepsilon_{\mathsf{t}}(u) \rangle = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathsf{t}} & & \end{cases}
$$

$$
\text{Avec :} \begin{cases} \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{e}} = \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{t}} - \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}^{\mathsf{th}} & \\ \boldsymbol{\varepsilon} & \text{Tenseur des déformations totales.} \\ \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{e}} & \text{Tenseur des déformations élastiques.} \\ \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}^{\mathsf{th}} & \text{Tenseur des déformations visco-plastiques.} \\ \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}^{\mathsf{th}} = \sum_s \gamma^s \boldsymbol{m}^s & \end{cases}
$$

$$
\text{Et :} \begin{cases} \boldsymbol{m}^s = \boldsymbol{b}^s \otimes \boldsymbol{n}^s & \text{Tenseur de Schmid du système } s. \\ \boldsymbol{n}^s & \text{Normale au plan de glissement du système } s. \\ \boldsymbol{b}^s & \text{Direction othogonale à la ligne de dislocation} \\ & \text{engendrant le plan de glissement du système } s. \\ \gamma^s & \text{Cisaillement propre au système } s. \end{cases}
\tag{II.13}
$$

Pour développer son approche micromécanique en champs complets, [**Portelette 2018**] a distingué deux étapes. L'une consiste à établir une loi de comportement à l'échelle du monocristal et à la calibrer sur les essais expérimentaux existants et présentés dans la partie précédente. La seconde intègre cette loi à l'échelle du polycristal avec prise en compte de l'écrouissage et ce afin de rendre compte de l'impact des joints de grains sur la mobilité des dislocations. En ce sens, l'auteur introduit les dislocations géométriquement nécessaires (GND). Ces dernières traduisent l'effet Hall-Petch [**E. Hall 1951 ; Petch 1953**], déjà évoqué précédemment, qui se traduit par l'empilement des lignes de dislocations sur les joints de grains. L'étude des travaux de thèse de [**Portelette 2018**] se fait en

deux étapes au sein de ce document en respectant le schéma énoncé ci-dessus.

II.2.2.1 Aspect monocristallin et calibration de la loi monocristalline

Il est à rappeler que le dioxyde d'uranium a une structure cristalline cubique face centrée du type fluorine comme illustrée Fig. II.15. Cette configuration particulière confère 3 axes équivalents et 3 plans de symétries orthogonaux entre eux. La symétrie est cubique, le comportement est élastiquement anisotrope. Le tenseur d'élasticité $\boldsymbol{L}$, reliant contrainte et déformation de l'équation Eq. II.13, est entièrement défini par la donnée de 3 coefficients matériau que sont le module d'Young E, le coefficient de Poisson ν et le module de cisaillement G.

$$\dot{\gamma}^{\,s} = \rho_m^s b \nu_s$$

$$\nu_s = \nu_D b e^{-(\frac{\Delta H(\tau^s)}{k_B T})}$$

Avec : $\Delta H(\tau^s) = \Delta H_0^i [1 - (\frac{\tau^s}{\tau_P^i})^p]^q$

	$i \in \{\{100\},\{110\},\{111\}\}$	i, Propre à chacune des familles.	
	ΔH_0^i	Barrière d'énergie à contrainte nulle de la famille i du système s.	$[eV]$
Et :	τ_P^i	Contrainte critique de Peierls de la famille i que doit dépasser la contrainte résolue τ^s du système s.	$[MPa]$
	ρ_m^s	Densité de ligne de dislocations sur le système s.	$[m]^{-2}$
	De plus : $p \in [0.5, 1]$, $q \in [1, 2]$	**[Kocks et al. 1975]** / **[Frost et Ashby 1982]**	

(II.14)

Comme cité précédemment, le mécanisme retenu est le glissement des lignes de dislocations franchissant la barrière de Peierls **[Peierls 1940]**. Le franchissement de cette barrière nécessite une certaine quantité d'énergie. Cette énergie comprend un apport thermique et un apport mécanique. Deux méthodes peuvent être adoptées. Dans la première, reprise par l'équation Eq. II.14 et traduisant physiquement le mécanisme de franchissement par double décrochement **[Seeger 1956]**, les apports thermique et mécanique sont couplés. Les paramètres, qui ont un sens plus physique que ceux de la deuxième approche, font référence à la barrière d'énergie de Peierls à franchir. La deuxième approche, reprise en équation Eq. II.15, consiste à découpler les apports thermique et mécanique. Pour le dire plus clairement, l'énergie n'est plus qu'une superposition d'une énergie fournie thermiquement et d'une autre fournie mécaniquement. Les paramètres n'ont plus vraiment un sens physique à proprement parler.

Dans ses travaux, **[Portelette 2018]** utilise les grandes déformations (Eq. II.15), afin de pouvoir rendre compte des rotations du réseau cristallin, rotations qui peuvent être importantes suivant la sollicitation envisagée. L'hypothèse des petites perturbations ne serait plus valable dans certains cas, notamment lorsque qu'il y a une rotation importante du réseau cristallin. Pour les simulations numériques, nécessaires à la calibration de la loi monocristalline, **[Portelette 2018]** utilise un parallélépipède de dimensions $2.8 \times 2.8\,[mm]^2 \times 8\,[mm]$. Ce dernier est subdivisé en 250 éléments cubiques quadratiques (chaque élément comporte 20 noeuds - 27 points d'intégrations).

$$\dot{\gamma}^{\,s} = \rho_m^s b \nu_s$$

$$\nu_s = sgn(\tau^s) \times \nu_D b e^{-(\frac{\Delta H_0^i}{RT})} [CosH(\frac{\tau^s}{\tau_0^i}) - 1]$$

Avec :

ΔH_0^i	Barrière d'énergie de la famille i du système s	$[eV]$	
τ_0^i	Contrainte critique seuil de la famille i que doit dépasser la contrainte résolue τ^s du système s	$[MPa]$	
$\tau^s = \boldsymbol{M} : \boldsymbol{m^s}$	$\boldsymbol{m^s}$ Tenseur de Schimd du système(s) $\boldsymbol{M}$ Tenseur de Mandel		(II.15)
$\boldsymbol{M} = (\boldsymbol{F_e})^T \cdot \boldsymbol{F_e} \cdot \boldsymbol{\Pi}$	$\boldsymbol{F_e}$ Transformation élastique $\boldsymbol{\Pi}$ Tenseur de Piola-Kirschhoff		
$b = \frac{a_0}{\sqrt{2}}$	Norme du vecteur de Burgers		
ρ_m^s	Densité de ligne de dislocations sur le système s	$[m]^{-2}$	

Où :

$\nu_D = 4.94 \times 10^{13}$	Fréquence de DEBYE	$[s]^{-1}$
$a_0 = 5.47$	Paramètre de maille	$[\mathring{A}]$

[Portelette 2018] a effectué les deux approches, néanmoins il a rencontré des difficultés sur la première approche ce qui l'a conduit dans la suite à ne garder que la deuxième (Eq. II.15). Celle-ci nécessite tout d'abord l'identification des paramètres ($\Delta H_0^i, \tau_0^i$, voir Eq. II.15) propres à chacune des familles et des densités de lignes de dislocations propres à chacun des systèmes de glissement (ρ_m^s). Cette dernière est prise égale pour chacun des systèmes constituant les familles.

$$\tau^s = \tau_0^i \times CosH^{-1}(1 + \frac{\dot{\bar{\varepsilon}}_{\mathsf{t}}}{f^s \rho_m^s \nu_D b^2 e^{-(\frac{\Delta H_0^i}{k_B T})}}) \tag{II.16}$$

L'équation Eq. II.16 permet d'identifier les paramètres. Certaines hypothèses fortes ont été faites. Notamment celles de dire que la déformation plastique est entièrement supportée par un système de glissement ($\dot{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}^{\mathsf{th}} = f^s \times \dot{\gamma}^{\,s}$) et que $\dot{\sigma} = 0$ avec $\dot{\boldsymbol{\sigma}} = \boldsymbol{L} : (\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathsf{t}} - \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathsf{vp}}^{\mathsf{th}})$. Ceci permet notamment d'inverser l'équation Eq. II.15 pour obtenir l'équation Eq. II.16 nécessaire à l'identification des paramètres. En d'autres termes, il ne faudrait théoriquement retenir que les essais où du glissement simple a été observé. Après avoir sélectionné les données traitant des contraintes résolues de cisaillement critique ([**Nadeau 1969**], [**Yust et McHargue 1969**], [**Sawbridge et Sykes 1971**], [**Lefebvre 1977**], [**Byron 1968a**], [**Mordike 1976**], ... étude bibliographique de la compression des monocristaux de dioxyde d'uranium), l'auteur utilise une minimisation par moindre carrés afin obtenir ses paramètres. Après identification de ces derniers, [**Portelette 2018**] peut comparer les courbes de contraintes déformations obtenues avec le modèle développé dans ses travaux avec celles obtenues par les essais expérimentaux.

Seuls les essais expérimentaux de compression tirés de [**Sawbridge et Sykes 1971**] ont servi à valider la loi de comportement monocristalline utilisée dans les travaux de [**Portelette 2018**], ce qui peut être sujet à discussions, discussions évoquées dans la suite de ce paragraphe. Les conditions expérimentales de [**Sawbridge et Sykes 1971**] sont les suivantes : température de l'ordre de $T \sim 1327\,[°C]$, stoechiométrie de l'ordre de $\chi < 2.001$, vitesse de déformation de l'ordre de $\dot{\bar{\varepsilon}} \sim 10^{-4}\,[s]^{-1}$, dimensions géométriques du monocristal $\varnothing = 2.84 \pm 0.005\,[mm]$ $\times 8\,[mm]$, effet de l'orientation de l'axe de compression avec le balayage de deux orientations définies par deux angles $\phi \in [001] \rightarrow [\bar{1}11]$

et $\Omega \in [011] \rightarrow \phi = 16\,[°]$.

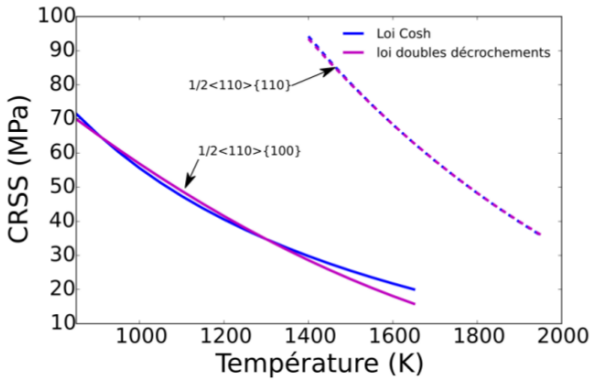
Ces essais [**Sawbridge et Sykes 1971**] ont la particularité de balayer différentes orientations possibles pour l'axe de compression et ainsi activer, suivant l'orientation de l'axe de compression, certaines familles et systèmes en particulier. Ceci permet notamment de pouvoir ajuster les différents paramètres $(\Delta H_0^i, \tau_0^i, \rho_m^s)$.

De par le manque d'informations sur la famille {111} et notamment l'incapacité totale d'obtenir les paramètres $(\Delta H_0^i, \tau_0^i, \rho_m^s)$, contrairement aux deux autres familles ({100}, {110}), l'auteur distingue 3 cas différents. Le premier ne consiste à ne garder que les familles ({100}, {110}) et à écarter la dernière famille {111} par manque de connaissance. Le deuxième cas est de placer la famille {111} aussi dur que la famille la plus dure, à savoir la famille {110}. Ceci revient à se rapprocher des observations de [**Byron 1968a ; Mordike 1976**]. Enfin le dernier cas est d'envisager la famille {111} en intermédiaire des familles {100} et {110}. Logiquement dans ce dernier cas la famille dure {110} ne devrait pas ou peu s'activer. De plus l'auteur diminue fortement la densité de dislocations présente sur la famille {100} (ce qui revient à augmenter la contrainte résolue de cisaillement critique de cette famille) afin de favoriser le glissement sur la famille intermédiaire {111}. Ceci revient à envisager l'observation faite de [**Seltzer et al. 1972b**] sur la déviation à la stoechiométrie et l'impact plus importante de celle-ci sur la contrainte résolue de cisaillement critique de la famille {111} par rapport à celle de la famille {110} (observations faites par [**Keller et al. 1988b**]). Ceci rejoindrait les observations de [**Sawbridge et Sykes 1971**]. Il est à noter qu'il n'y a pas d'interaction entre les différents systèmes de glissement. Le glissement dévié, observé par une très grande majorité d'auteurs, n'est pas pris en compte au sein de ce modèle. Au-delà de l'étude des contraintes d'écoulement et des courbes contraintes-déformations, l'auteur étudie également la rotation du réseau cristallin.

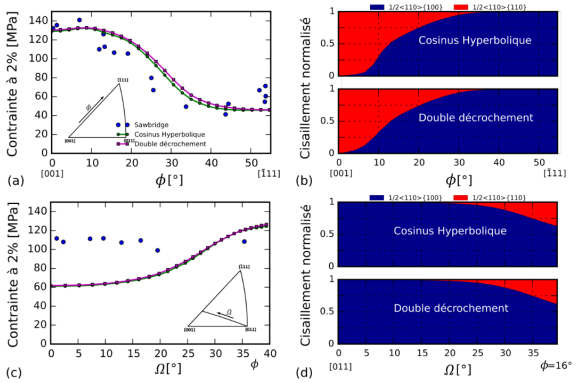
Dans un premier temps, la comparaison des lois en cosinus hyperbolique Eq. II.15 et celle modélisant le double décrochement Eq. II.14 donne des résultats similaires Fig. II.17 pour l'étude du cas 1 mentionné ci-dessus. Dans ce cas, il est à rappeler que seules les familles {100} et {110} sont considérées. Les contraintes résolues de cisaillement critique pour les deux lois sont en bon accord et donnent les même résultats comme l'atteste la figure Fig. II.17-(a). [**Portelette 2018**] pousse un peu plus l'analyse en étudiant les contraintes d'écoulement (contrainte correspondant à une déformation de 2% - $\sigma_{ecoul} = f(\varepsilon_{ecoul})$ avec $\varepsilon_{ecoul} \sim 2\%$) en fonction de l'orientation de l'axe de compression et notamment en balayant la gamme des deux orientations définies par [**Sawbridge et Sykes 1971**] que sont les angles ϕ et Ω. Les résultats issus de l'application des deux lois, voir figure Fig. II.17-(b), sont peu différentiables. L'application de l'une ou l'autre des lois, pour ce cas, revient à la même chose. La loi par double décrochement a beau être un peu plus physique que la deuxième, elle mène néanmoins au même résultat.

Dans un deuxième temps, [**Portelette 2018**] essaie d'améliorer la calibration de la loi monocristalline sur les essais de [**Sawbridge et Sykes 1971**]. La figure Fig. II.18-(a), qui illustre le cas 1, permet de rendre compte de plusieurs points. Tout d'abord pour une faible orientation de l'angle ϕ, $\phi \sim 2\,[°]$, la prise en compte de la famille {110} semble être bonne. Cette famille s'active seule et celle-ci est bien retrouvée par la simulation. Pour une forte valeur de l'angle ϕ, $\phi > 25.5 - 30\,[°]$, seule la famille {100} doit s'activer. Ceci est bien retrouvé comme attesté par la figure Fig. II.18-(b) graphique (b) cas 1, qui présente la participation des différentes familles à la contrainte. Néanmoins la simulation conduit à une sur-estimation systématique des contraintes (Fig. II.18-(a)) pour des valeurs de ϕ importantes. Pour l'orientation intermédiaire, proche d'un angle $\phi \sim 16\,[°]$, les contraintes sont sur-estimées. Cette sur-estimation peut provenir de la non prise en compte par le modèle du mécanisme de glissement dévié. Pour l'oriente mécanismes d'interactions entre les plans de glissement. Ce type d'interactions n'est pas pris en compte et ceci pourrait relaxer les sur-contraintes obtenues.

Pour le cas 2 et malgré l'ajout de la famille {111} aussi dur que la famille {110}, il est à noter que celui-ci conduit à des réponses numériques quasiment équivalentes au cas 1. En effet, très peu de changements peuvent être observés sur la figure Fig. II.18-(b) que cela soit sur l'orientation balayée par l'angle ϕ ou celle balayée par l'angle Ω. Les résultats sont en très bon accord sur l'axe de compression balayant le domaine défini par l'angle ϕ alors que les cas 1 et 2 ne sont pas capables de

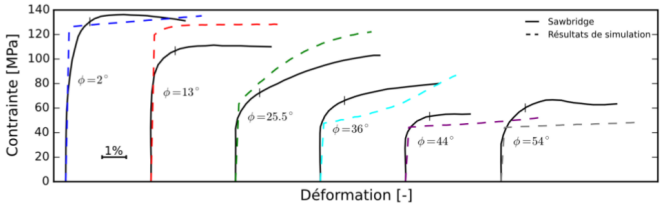


(a) Contrainte résolue de cisaillement critique en fonction de la température.

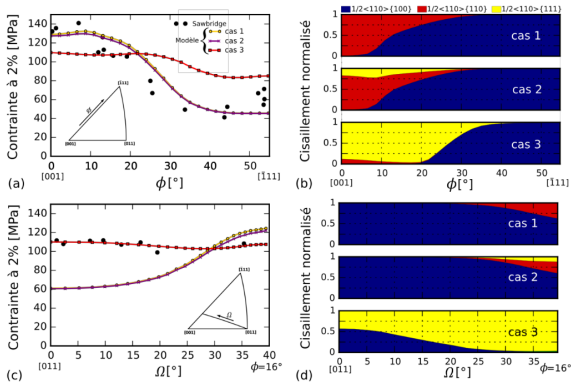


(b) Contrainte à $\varepsilon \sim 2\%$ selon l'orientation ϕ et Ω (à gauche) avec la participation normalisée des différentes famille à la contrainte (à droite).

FIGURE II.17 – Cas 1 : Comparaison loi double décrochement Eq. II.14 vs loi en cosinus hyperbolique Eq. II.15. [**Portelette 2018**] *vs* mesures expérimentales [**Sawbridge et Sykes 1971**]



(a) Courbes des contraintes déformations pour différentes orientations de l'axe de compression (angle ϕ variable) - Cas 1.



(b) Contrainte à $\varepsilon \sim 2\%$ selon l'orientation ϕ et Ω (à gauche) avec la participation normalisée des différentes familles à la contrainte (à droite).

FIGURE II.18 – Comparaison des cas 1-2-3. Courbes simulées des contraintes en fonction des déformations (cas 1 figure :(a)) ou des contraintes calculées à 2% de déformation (cas 1, 2 et 3 figure (b)). [**Portelette 2018**] *vs* mesures expérimentales [**Sawbridge et Sykes 1971**]

rendre compte numériquement des résultats expérimentaux lorsque l'axe de compression balaye le domaine défini par l'angle Ω. Le cas 3 par contre, cas où la famille $\{111\}$ est placée en intermédiaire des familles $\{100\}$ et $\{110\}$, conduit à des changements radicaux (cf. Fig. II.18-(b)). Comme mentionné au dessus, la famille $\{110\}$ ne s'active quasiment plus, effet qui était prévisible. Lorsque l'axe de compression balaye le domaine défini par l'angle Ω, la contrainte d'écoulement obtenue par les simulations correspond à celle obtenue expérimentalement. Les résultats sont en très bon accord sur l'axe de compression balayant le domaine défini par l'angle Ω, alors que le modèle n'est pas capable de rendre compte des résultats expérimentaux lorsque l'axe de compression balaye le domaine défini par l'angle ϕ. Au vu des données, il ne semblerait pas possible de concilier les deux orientations avec le modèle actuel et des hypothèses associées.

Cette famille $\{111\}$ est problématique. Les résultats numériques [**Portelette 2018**] obtenus n'ont pas permis d'être conclusifs sur la prise en compte ou non de cette famille dans la loi. D'un côté la littérature fournit très peu d'informations sur cette dernière, ce qui ne permet pas d'avoir les paramètres de celle-ci ($\Delta H_0^{\{111\}}, \rho_m^s, \tau_0^{\{111\}}$). D'un autre côté l'expérience montre qu'elle est belle et bien

présente sans toutefois fournir beaucoup de précisions quant à son activation. Il est à rappeler qu'elle est d'autant plus présente que la déviation à la stoechiométrie est importante. Sa prise en compte semble judicieuse afin de bien rendre compte de la rotation du réseau cristallin et des différentes contraintes obtenues notamment lorsque l'axe de compression balaie l'orientation Ω. Cependant il est à noter que la prise en compte de cette famille $\{111\}$ détériore fortement les résultats sur l'orientation ϕ (contraintes d'écoulement, rotation du réseau cristallin) et ce alors que ces résultats étaient bons lorsque les familles $\{100\}$, $\{110\}$ étaient prise seules.

$$\dot{\gamma}^{\,s} = \rho_m^s b^2 \nu_D e^{(-\frac{\Delta H_0^s}{k_b T})} [cosh(\frac{\tau^s}{\tau_0^s}) - 1] e^{(-\frac{\tau_c^s}{\tau_0^s})}$$

Avec :

$$\tau_c^s = \mu b \sqrt{\sum_u a^{su} \rho^u}$$

$$\dot{\rho}^{\,s} = \frac{1}{b}(\sqrt{\sum_u (\frac{a^{su}}{(K^{su})^2}) \rho^u} - 2 y_c \rho^s) |\dot{\gamma}^{\,s}|$$

Et :

y_c	Rayon de capture moyen des dislocations
a^{su}	Coefficient issu de la matrice d'interaction
μ	Coefficient de cisaillement
K^{su}	Coefficient de stockage caractérisitique de l'interaction
$K^{su} = \frac{\sqrt{a}(1-\kappa)^{\frac{3}{2}} \times n}{p_0 \times k_0 \times (n-1-\kappa)}$	Si l'interaction forme des jonctions

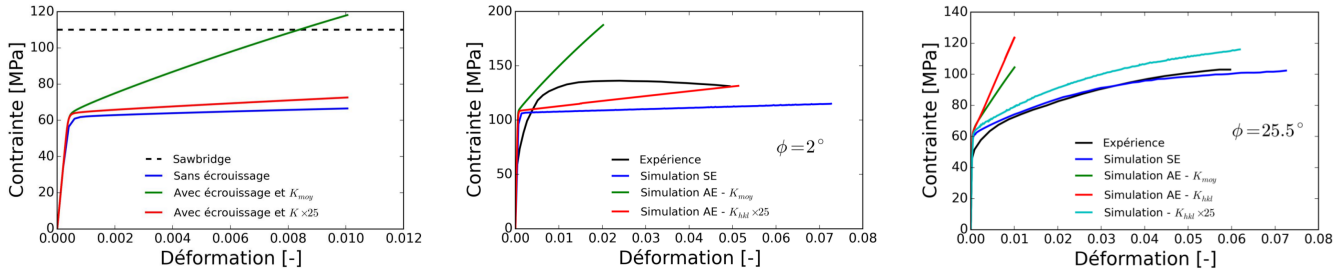
(II.17)

Où :

$K^{su} = 150$	Si l'interaction est dipôlaire
$p_0 = 0.117$	
$k_0 = 1.08$	
$\kappa = 0.225$	
$\sqrt{a}$	Valeur moyenne des coefficients entre système actif
$y_c = 10.8 \times b$	

Après cette première étape, **[Portelette 2018]** garde le cas 3 et y introduit de l'écrouissage monocristallin (Eq. II.17) traduisant l'interaction des lignes de dislocations entre elles par le modèle de La Forêt. Cette partie n'est pas vraiment concluante dans la mesure où l'introduction de cet écrouissage semble dégrader les résultats des simulations. Les courbes de contraintes déformations pour les orientations $\phi = \{2.0, 25.5\}\,[°]$, $\Omega = 20.0\,[°]$ (sans la courbe contrainte-déformation pour cette dernière orientation) sont reprises Fig. II.19-(a)-(b)-(c). Il apparaît clairement que les courbes de contraintes-déformations, issues de la loi sans écrouissage, sont bien plus proches des courbes issues de l'expérience que celles issues des lois avec écrouissage. La correction du coefficient K_{hkl} ($K_{hkl} \times 25$) permet d'obtenir des résultats un peu plus satisfaisants pour la loi avec écrouissage. Néanmoins sans cette correction, les courbes avec écrouissage présentent un durcissement trop important par rapport aux courbes expérimentales. L'ajout de l'interaction des lignes de dislocations, mécanisme cité une fois dans la bibliographie sur les monocristaux, semblerait pertinente pour une gamme de températures de l'ordre de $T \in [600, \sim 800]$ $[°C]$. En effet dans cette gamme de température, l'écrouissage obtenue expérimentalement est plus important que celui obtenu pour cette température. Dans la gamme de températures étudiée, la déformation visco-plastique ne semblerait pas induite (ou du moins peu induite) par le mécanisme d'interaction des lignes de dislocations du fait de la différence d'écrouissage. Les simulations de **[Portelette 2018]** confortent cette idée.

En résumé, la loi monocristalline sans écrouissage développée dans les travaux de [Portelette 2018] et issue des travaux de [Pacull 2011 ; Soulacroix 2014], permet de rendre compte dans certains cas et pour certaines orientations des courbes contraintes déformations obtenues expérimentalement et notamment des courbes expérimentales de [Sawbridge et Sykes 1971]. Dans cette loi, la prise en compte de la famille $\{111\}$ **est**



(a) $\Omega = 20.0\,[°]$. (b) $\phi = 2.0\,[°]$. (c) $\phi = 25.5\,[°]$.

FIGURE II.19 – Courbes contraintes-déformations cas 3, pour différentes orientations de l'axe de compression. SE pour sans écrouissage Eq. II.15, AE pour avec écrouissage Eq. II.17 et la dernière avec une correction du coefficient de stockage. [**Portelette 2018**] *vs* mesures expérimentales [**Sawbridge et Sykes 1971**]

problématique. Comme énoncé précédemment, les données sur cette famille, pour les matériaux ne présentant pas une déviation à la stoechiométrie, sont quasiment voire totalement inexistantes. En outre, la contrainte résolue de cisaillement critique pour cette famille n'est pas connue. De plus cette dernière famille n'est jamais observée seule (hors matériau présentant une certaine déviation). Ceci amène deux hypothèses de travail. Dans la première, la famille $\{111\}$ est intermédiaire aux deux autres familles ($\tau_{\{100\}} << \tau_{\{111\}} < \tau_{\{110\}}$), cas 3 étudié par [Portelette 2018]. Dans ces travaux, [Portelette 2018] a dû modifier les paramètres des autres familles (densité de dislocation de la famille $\{100\}$) pour activer suffisamment cette famille. Dans la pratique, l'auteur a annihilé la famille $\{110\}$, famille observée expérimentalement. Dans la deuxième hypothèse de travail, la contrainte résolue de cisaillement critique de la famille $\{111\}$ est légèrement supérieure à celle de la famille dur $\{110\}$ ($\tau_{\{100\}} << \tau_{\{110\}} \leq \tau_{\{111\}}$). Cette deuxième hypothèse permettrait notamment d'activer convenablement la famille $\{110\}$. La deuxième hypothèse est à approcher du cas 2 traité par [Portelette 2018], cas qui n'a pas été très conclusif notamment lorsque l'axe de compression balaie le domaine défini par l'angle Ω.

Pour ce qui est de la loi monocristalline avec écrouissage, écrouissage traduisant l'interaction des lignes de dislocations entre elles, celle-ci n'est pas concluante. L'ajout de l'écrouissage induit un écrouissage important, écrouissage qui n'est pas présent sur les courbes expérimentales dans le domaine de températures étudié. Cependant cette approche pourrait convenir dans le domaine des températures intermédiaires $T \in [600, 1000]\,[°C]$, domaine où les auteurs observent un écrouissage important.

Il est à noter que la loi par double décrochement [**Seeger 1956**] couplant thermique et mécanique pour le franchissement de la barrière de Peierls [**Peierls 1940**], et la loi en cosinus hyperbolique découplant mécanique et thermique, sont similaires pour le cas 1 étudié par [**Portelette 2018**]*. Elles sont similaires à la fois sur la contrainte résolue de cisaillement critique des familles $\{100\}$ et $\{110\}$ en fonction de la température et à la fois sur la contrainte d'écoulement pour les différentes orientations testées ([**Sawbridge et Sykes 1971**] vs simulations).

Enfin, [**Portelette 2018**] étudie en plus des courbes contraintes déformations, la rotation du réseau cristallin. Celle-ci n'a pas été trop abordée ici car elle est essentiellement qualitative. Néanmoins l'auteur ne retrouve pas toujours la direction de rotation du réseau obtenue dans les essais expérimentaux de [**Sawbridge et Sykes 1971**]. Ceci pourrait s'expliquer par la prise en compte problématique de la famille $\{111\}$.

∗. Seul le cas 1 a été étudié. [**Portelette 2018**] ne compare pas les deux formalismes dans les deux autres cas d'études (cas 2-3).

II.2.2.2 Aspect polycristallin et calibration de la loi polycristalline

La deuxième étape s'attache à calibrer l'approche en champ complet (FEM) polycristalline sur des essais macroscopiques. Le polycristal est généré via un Volume Élémentaire Représentatif (VER) issu des travaux de thèses de [**Pacull 2011 ; Soulacroix 2014**]. Pour les simulations numériques nécessaires à la calibration de la loi polycristalline, [**Portelette 2018**] utilise le volume élémentaire cité précédemment, constitué d'une centaine de grains et qu'il maille avec des éléments tétraédriques ($\sim 27 \times 10^3$ éléments). Au sein des grains, la loi de comportement monocristalline, exposée dans la paragraphe précédent, est appliquée. Cependant cette fois l'écrouissage est introduit et traduit par les dislocations géométriquement nécessaires (GND). Le système d'équations se transforme et devient Eq. II.18, présenté ci-dessous.

$$\dot{\gamma}^s = \rho_m^s b^2 \nu_D e^{(-\frac{\Delta H_0^s}{k_b T})} [cosh(\frac{\tau^s}{\tau_0^s}) - 1] e^{(-\frac{\tau_c^s}{\tau_0^s})}$$

Avec :

$$\tau_c^s = k_0 \mu b \sqrt{\sum_u a^{su} \rho_{GND}^u}$$

$$\rho_{GND}^s = \frac{1}{b} \sqrt{\mathrm{d}\overrightarrow{b}^s \cdot \mathrm{d}\overrightarrow{b}^s}$$

Et :

$$\mathrm{d}\overrightarrow{b}^s = \overrightarrow{\nabla} \gamma^s = \mathrm{d}b_v^s \cdot \overrightarrow{l}^s + \mathrm{d}b_c^s \cdot \overrightarrow{m}^s$$

$$\rho_{GNDv}^s = \frac{\mathrm{d}b_v^s}{b} = \frac{1}{b} \overrightarrow{\nabla} \gamma^s \cdot \overrightarrow{l}^s$$

$$\rho_{GNDc}^s = \frac{\mathrm{d}b_c^s}{b} = \frac{-1}{b} \overrightarrow{\nabla} \gamma^s \cdot \overrightarrow{m}^s$$

Finalement :

$$\rho_{GND}^s = \sqrt{(\rho_{GNDv}^s)^2 + (\rho_{GNDc}^s)^2}$$

k_0 — Coefficient empirique

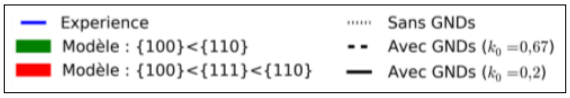
$\overrightarrow{l}^s$ — Vecteur dans la direction de la ligne de dislocation contenu dans le plan de glissement du système s

$\overrightarrow{m}^s$ — Vecteur orthogonal à $\overrightarrow{l}^s$ contenu dans le plan de glissement du système s

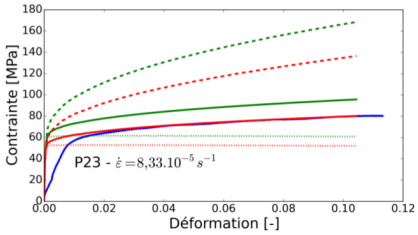
(II.18)

Les dislocations géométriquement nécessaires traduisent l'effet des joints de grains sur la mobilité des lignes de dislocations. Les joints de grains agissent comme des obstacles pour ces dernières. Les lignes glissant sur les différents systèmes vont être stoppées par les joints de grains. À mesure que le taux de déformation augmente, des lignes sont générées et vont venir s'empiler sur les lignes déjà bloquées par ces obstacles. Ceci entraîne une augmentation de la contrainte. L'équation Eq. II.18 traduit en quelque sorte l'effet Hall-Petch [**E. Hall 1951 ; Petch 1953**] déjà évoqué précédemment au sein de ce document. Cet effet traduit le durcissement introduit par l'introduction des obstacles, que sont les joints de grains, et est dépendant de la taille de grain. Plus la taille de grain est petite, plus les dislocations rencontreront et s'empileront rapidement sur les joints de grains. La contrainte augmentera alors plus rapidement. À l'inverse, plus la taille de grain est élevée, plus les dislocations mettront de temps pour s'empiler sur ce type d'obstacle.

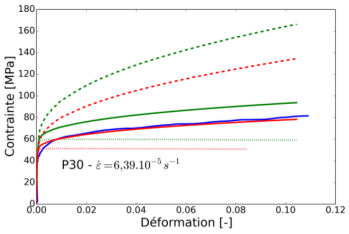
La figure Fig. II.20-(a)-(b)-(c) reprend la comparaison des courbes contraintes déformations entre le modèle polycristallin développé dans les travaux de [**Portelette 2018**] et les courbes expérimentales réalisées par [**Ben Saada 2017**]. Les courbes basées sur le modèle qui ne prend pas en compte les lignes de dislocations géométriquement nécessaires (GND), ont les contraintes les plus basses et leurs réponses n'exhibent que très peu de durcissement (pente d'écrouissage quasiment nulle). Dans



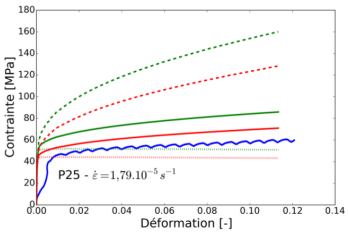
(a) Légende des 3 figures ci-dessous.



(b) P23 issu de BEN SAADA. $\dot{\varepsilon} \sim 8.33 \times 10^{-5}\,[s]^{-1}$.



(c) P30 issu de BEN SAADA. $\dot{\varepsilon} \sim 6.39 \times 10^{-5}\,[s]^{-1}$.



(d) P25 issu de BEN SAADA. $\dot{\varepsilon} \sim 1.79 \times 10^{-5}\,[s]^{-1}$.

FIGURE II.20 – Courbes contraintes-déformations : loi polycristalline cas 1 en vert, cas 3 en rouge. [**Portelette 2018**]
Comparaison aux courbes expérimentales.
[**Ben Saada 2017**]

ce dernier modèle, les joints de grains ne jouent pas le rôle d'obstacle, ceci revient à considérer le polycristal comme un monocristal. Il est donc normal de ne pas observer de durcissement. Les courbes basées sur le modèle qui prend en compte les lignes de dislocations géométriquement nécessaires, exhibent un fort durcissement avec des pentes d'écrouissage bien supérieures à celles obtenues par l'expérience. Ceci a obligé [**Portelette 2018**] à ajuster empiriquement le modèle polycristallin à l'aide du coefficient k_0. Il est à noter que la courbe des contraintes-déformations issue du modèle avec prise en compte de la famille {111} en intermédiaire des deux autres familles est constamment en dessous de celle issue du modèle ou cette dernière famille n'est pas prise en compte. Ceci peut s'expliquer en considérant qu'il y a plus de systèmes de glissement disponibles pour accommoder la contrainte. L'utilisation du coefficient empirique k_0 traduit un certain manque de connaissance et la complexité des mécanismes pouvant agir dans l'accommodation de la contrainte. Les auteurs, étudiés dans la littérature, envisagent plusieurs mécanismes : mécanismes qui ne sont pas tous décris par le modèle et qui doivent être portés par ce coefficient empirique. De ces mécanismes, il peut être mis en avant le mécanisme de glissement dévié et le mécanisme de montée de dislocations. Ce dernier mécanisme (mécanisme de montée de dislocations) devient de plus en plus important à mesure que la température augmente. Il est à noter que la vitesse de déformation a un impact sur la comparaison des courbes. Cette dernière peut notamment influencer le mécanisme induisant la déformation viscoplastique, mécanisme qui comme évoqué précédemment n'est peut-être pas décris par le modèle de glissement des lignes de dislocations franchissant la barrière de Peierls [**Peierls 1940**].

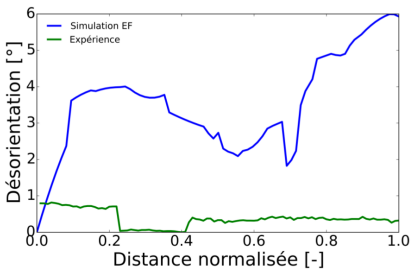
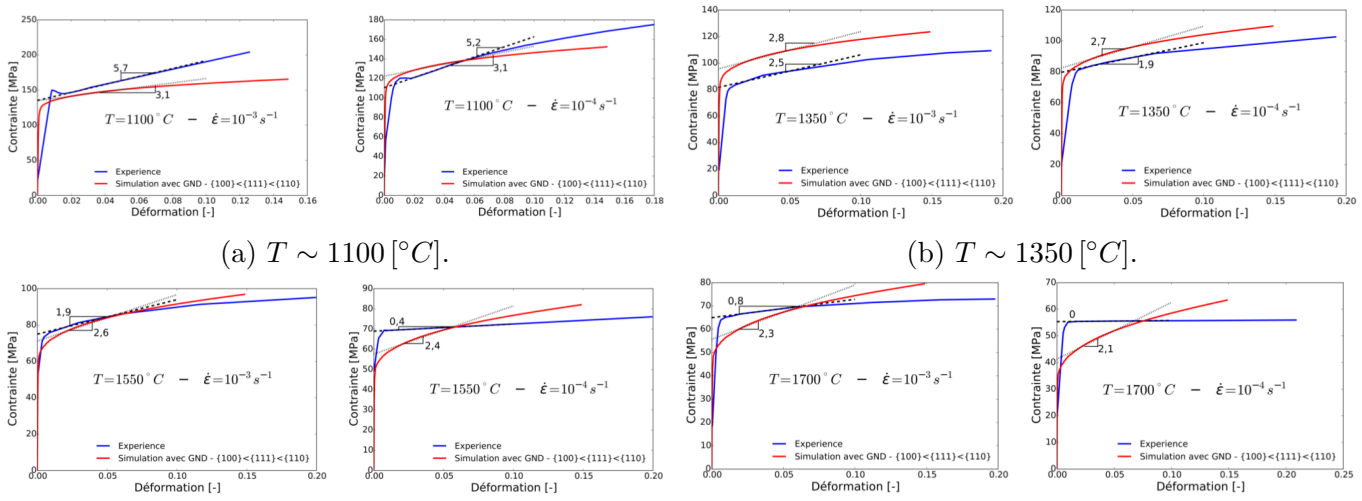


FIGURE II.21 – Désorientation entre l'orientation moyenne du grain et une certaine zone à l'intérieur d'un grain. La discontinuité traduit la présence de sous-joint de grains. [**Portelette 2018**]

Dans l'essai étudié tiré des travaux de [**Ben Saada 2017**], la désorientation est relativement faible

avec la présence claire d'un sous-joint de grain. D'après la figure Fig. II.21, la simulation a tendance à sur-prédire la désorientation et ne pas pouvoir mettre en valeur la présence de sous-joints de grain. Cet écart important entre mesure et expérience sur la désorientation, pourrait s'expliquer par la méthode employée. En effet la méthode Finite Element Method pourrait sur-prédire la désorientation comme observé par [**Portelette 2018**]. [**Ben Saada 2017**] obtient un sous-joint de grain presque traversant le grain (situé à une distance normalisée proche de 0.5). Ce dernier, formé par agencement des lignes de dislocations proches des joints de grains, a migré dans le grain lorsque le taux de déformation a augmenté ([**Ben Saada 2017**]).



(a) $T \sim 1100\,[°C]$.

(b) $T \sim 1350\,[°C]$.

(c) $T \sim 1550\,[°C]$.

(d) $T \sim 1700\,[°C]$.

FIGURE II.22 – Courbes des contraintes en fonction des déformations : loi polycristalline issue du cas 3 calibré avec prise en compte des GND. [**Portelette 2018**]
Comparaison aux courbes expérimentales (Lot faible densité).
[**Salvo 2014**]
Sur chacune des figures : à gauche $\dot{\varepsilon} \sim 10^{-3}\,[s]^{-1}$, à droite $\dot{\varepsilon} \sim 10^{-4}\,[s]^{-1}$.
[**Portelette 2018**]

Pour ce qui est de la comparaison avec les essais macroscopiques tirés des travaux de thèse de [**Salvo 2014**], il est à remarquer (cf Fig. II.22) la différence de pente d'écrouissage obtenue entre l'expérimental et la simulation numérique de [**Portelette 2018**]. Cette pente est relativement bien retrouvée pour une température de $T \sim \{1350, 1550\}\,[°C]$ et pour une vitesse de déformation de l'ordre de $\dot{\bar{\varepsilon}} \sim 10^{-3}\,[s]^{-1}$. Ce bon accord semblerait provenir du fait que [**Portelette 2018**] calibre la loi monocristalline sur les essais de [**Sawbridge et Sykes 1971**], essais qui sont effectués à la même température. Cette pente issue de la simulation numérique est peu sensible à la variation de température, sensibilité à la température qui est observée pour la pente d'écrouissage issue des essais expérimentaux. Cette invariance traduit le fait que la capacité des joints de grains à agir comme obstacles, dans le modèle polycristallin développé, n'est pas dépendante de la température ou de la vitesse de déformation. Or l'étude des données issues des travaux de thèse de [**Salvo 2014**], montre que la pente d'écrouissage des courbes de contraintes-déformations diminue lorsque la température augmente, diminution qui est bien observée sur la figure Fig. II.22. L'idée serait que les lignes de dislocations même à hautes températures et basses vitesses de déformation soient bloquées par les joints de grains, mais qu'un ou plusieurs mécanismes agissent sur ces dernières et les remobilisent. Pour une pente d'écrouissage quasiment nulle, il y aurait un équilibre entre l'immobilisation des lignes de dislocations à cause des joints de grains et leur remobilisation par un mécanisme tiers. Le mécanisme de montée de dislocations pourrait permettre de remobiliser les lignes de dislocations stoppées par les joints de grains. **Quoi qu'il en soit, cette dépendance du coefficient empirique k_0 à la vitesse de déformation et la température (la densité**

pourrait être un paramètre secondaire) n'est pas reprise dans la loi polycristalline issue des travaux de [Portelette 2018]. D'après la figure Fig. II.20, plus le coefficient est petit, plus le comportement tend vers un comportement plastique parfait, c'est-à-dire vers la loi monocristalline sans écrouissage. En ce sens, le coefficient empirique k_0 pourrait être pris fonction de la température ainsi que de la vitesse de déformation et tendre vers 0 pour une température proche de $T \sim 1700 - 1800\,[°C]$ et une vitesse de déformation relativement faible. En d'autres termes, il faudrait que le comportement polycristallin, prenant en compte les dislocations géométriquement nécessaires, tende vers le modèle monocristallin sans écrouissage lorsque la température augmente et lorsque la vitesse de déformation n'est pas très élevée (de l'ordre de $\dot{\bar{\varepsilon}} \sim 10^{-4}\,[s]^{-1}$). Il est à noter que lorsque la vitesse de déformation augmente, les températures de transition augmentent. Il serait également intéressant de prendre le coefficient k_0 fonction de la vitesse de déformation.

La perte des capacités des joints de grains à agir comme obstacles pour les lignes de dislocations peut être envisagé. Néanmoins il peut être également envisagé un changement dans le mécanisme induisant la déformation visco-plastique, changement qui ne pourrait pas être repris par le modèle puisque ce dernier ne supporte explicitement qu'un seul mécanisme. Ce changement de mécanisme pourrait être repris par le coefficient empirique k_0 en le rendant dépendant de certains paramètres comme la température et la vitesse de déformation en premier lieu et de la densité en second lieu.

Pour ce qui est des contraintes d'écoulement, ces dernières sont relativement bien retrouvées.

II.2.2.3 Synthèse de l'approche micro mécanique à champ complet issue des travaux de [Portelette 2018]

En résumé l'approche micro mécanique à champ complet issue des travaux de [**Portelette 2018**] se divise en deux étapes claires. La première consiste à calibrer la loi monocristalline à l'aide des données sur les monocristaux. La deuxième s'attache à incorporer l'effet des joints de grains sur la loi précédente et à la calibrer sur les essais macroscopiques. Le mécanisme induisant la déformation visco-plastique retenu, ou du moins contribuant fortement, est le mécanisme de glissement des lignes de dislocations franchissant la barrière de Peierls [**Peierls 1940**].

Dans la première étape, [**Portelette 2018**] développe deux lois. Une loi représentant physiquement le franchissement de la barrière de Peierls par double décrochement [**Seeger 1956**] (couplage thermique et mécanique pour l'apport de l'énergie permettant le franchissement de la barrière), et une loi en cosinus hyperbolique (découplage thermique et mécanique) avec la perte du sens physique des paramètres utilisés. Les deux approches testées par l'auteur sont équivalentes pour le cas 1, cas où la famille {111} est écartée. Étant donné que l'auteur rencontre des difficultés dans l'utilisation de la première loi représentant le double décrochement, [**Portelette 2018**] fait le choix dans la suite d'utiliser celle supportée par le cosinus hyperbolique.

La loi monocristalline (avec le formalisme en cosinus hyperbolique) est calibrée sur les essais expérimentaux de [**Sawbridge et Sykes 1971**]. L'utilisation des données de [**Sawbridge et Sykes 1971**] peut notamment poser problème car [**Seltzer et al. 1972b**] émettent des doutes sur la déviation à la stoechiométrie des échantillons de ces auteurs. Cette déviation pourrait notamment entraîner une baisse des contraintes et également une activation prononcée de la famille {111}. Ceci est conforté par les observations de [**Byron 1968a ; Mordike 1976**] qui n'observent que les deux premières familles, ainsi que [**Alamo et al. 1978**] (sous-stoechiométrique) qui observent les même choses que [**Sawbridge et Sykes 1971**]. En d'autres termes, la famille {111} est problématique. Les données ne sont pas fournies par la littérature et cette dernière famille est très sensible à la déviation de la stœchiométrie, déviation qui n'est pas toujours bien contrôlée par les différents expérimentateurs. Ceci a conduit [**Portelette 2018**] à distinguer 3 cas. Il semblerait, en l'état actuel et au vu des résultats, qu'il ne soit pas possible de concilier une bonne calibration du modèle à la fois pour l'axe de compression balayant l'orientation définie par l'angle ϕ et à la fois pour l'axe de compression

balayant l'orientation définie par l'angle Ω. La prise en compte du mécanisme de glissement dévié, cité par une grande majorité d'auteurs, pourrait permettre de pallier ce problème.

[**Portelette 2018**] a ensuite introduit un écrouissage monocristallin, ou auto écrouissage des lignes de dislocations, traduisant l'interaction des lignes de dislocations entre elles. Cet auto écrouissage ne semble pas pertinent. Ce mécanisme, peu cité dans la littérature abordée, ne semble que peu contribuer à la déformation visco-plastique. Cette approche pourrait être intéressante dans le domaine de températures intermédiaires $T \in [600, 1000]\,[°C]$, domaine où les expérimentateurs relèvent un durcissement important sur les courbes contraintes déformations, notamment [**Byron 1968a**] et [**Mordike 1976**].

Pour le domaine de températures balayé, la loi monocristalline calibrée sans écrouissage rend suffisamment compte des courbes contraintes-déformations.

Dans la deuxième étape, [**Portelette 2018**] introduit les dislocations géométriquement nécessaires (GND), ceci afin de traduire la capacité des joints de grains à agir comme obstacles aux glissements des lignes de dislocations. Ceci traduit en quelque sorte l'effet Hall-Petch [**E. Hall 1951**] [**Petch 1953**]. Les lignes de dislocations vont être stoppées et vont venir s'empiler sur les joints de grains. Les dislocations vont également interagir entre elles. L'auteur introduit dans cette loi un coefficient empirique pour supporter les mécanismes qui ne seraient pas bien décris par le modèle, ceci afin de calibrer la loi polycristalline. Les résultats montrent une large sur-estimation de la rotation du réseau cristallin lors des simulations (étude comparative avec les données de [**Ben Saada 2017**]). Ces dernières ne permettent pas de rendre compte de la présence de sous-joints de grains, sous-joints de grains mis en avant dans les travaux de thèse de [**Ben Saada 2017**]. Cette sur-estimation pourrait provenir de la méthode numérique en elle-même (méthode numérique utilisée FEM). Les simulations des courbes contraintes-déformations et leur comparaison avec les données expérimentales de [**Salvo 2014**] montrent une bonne prévision de la contrainte d'écoulement dans le domaine étudié. Néanmoins la pente d'écrouissage issue des simulations est très peu sensible aux changements de températures et de vitesses de déformation contrairement aux pentes expérimentales. Expérimentalement, il semblerait que le comportement tende vers un comportement plastique parfait à mesure que la température augmente et que la vitesse de déformation reste relativement faible. Ceci pourrait être expliqué par la capacité d'un certain mécanisme (éventuellement le mécanisme de montée de dislocations) à remobiliser les lignes de dislocations stoppées par les joints de grains. Ce dernier permettrait aux lignes de dislocations de surmonter les joints de grains. Ce phénomène hypothétique, pouvant expliquer la décroissance de la pente d'écrouissage, n'est pas repris dans la loi polycristalline.

Au final, cette approche micromécanique, coûteuse en temps de calcul, permet de rendre compte des champs locaux et effectifs (contraintes et déformations) avec une prédiction plus ou moins satisfaisante. Ces approches développées dans les travaux de [**Pacull 2011 ; Soulacroix 2014 ; Portelette 2018**] permettent également de rendre compte, plus ou moins précisément, des courbes contraintes-déformations expérimentales à la fois d'un point de vue monocristallin et d'un point de vue polycristallin.

II.3 Une seconde approche à mettre en parallèle de l'approche micromécanique et introduction de la méthode de réduction de modèle NTFA

Précédemment, deux approches numériques à différentes échelles ont été présentées (cf. parties II.1.4 et II.2.2). La première est tirée des travaux de **[Salvo 2014]** et se place à l'échelle macroscopique. Il s'appuie, dans ses travaux, sur les courbes contraintes-déformations issues d'essais menés sur polycristaux pour identifier sa loi de comportement. La deuxième est tirée des travaux de **[Pacull 2011 ; Soulacroix 2014]** et plus récemment des travaux de **[Portelette 2018]**. Ces travaux se placent à l'échelle des grains et passent par l'identification d'un mécanisme pouvant induire la déformation viscoplastique. L'identification de la loi se fait sur des données expérimentales obtenues à l'échelle des monocristaux. Il s'en suit un processus de remontage d'échelle en prenant en compte l'effet des joints de grains pour l'appliquer à l'échelle polycristalline.

Cette section a pour but d'introduire deux approches.

La première s'appuie sur les travaux de **[Knezevic et al. 2013]**. Ces travaux ont été retenus car ils introduisent un formalisme de loi qui parait être intéressant lorsque de larges gammes de sollicitation, en température et en vitesse de déformation macroscopique, sont envisagées, comme c'est le cas pour le RIA.

La deuxième partie s'attache à introduire la méthode de réduction de modèle NTFA pour réduire les temps de calculs.

II.3.1 Mise en parallèle du formalisme proposé dans les travaux de [Knezevic et al. 2013]

Une des choses intéressantes dans les travaux de **[Knezevic et al. 2013]** est la manière dont les auteurs ont transformé la loi de comportement locale pour prendre en compte les paramètres de sollicitations macroscopiques. Ici c'est le formalisme qu'il est intéressant de regarder et non les mécanismes étudiés.

Pour rappel, les formalismes fréquemment rencontrés sont de la forme Eq. II.19.

Formalisme en loi hyperbolique :

$$\dot{\gamma}_s^{\mathsf{vp}} \propto \dot{\gamma}_0 \, exp\left(-\frac{\Delta G}{k_{\mathsf{b}} T}\right) \, Sinh\left[\frac{\tau_s}{\tau_s^0}\right]$$

Formalisme en loi puissance :

$$\dot{\gamma}_s^{\mathsf{vp}} \propto \dot{\gamma}_0 \, exp\left(-\frac{\Delta G}{k_{\mathsf{b}} T}\right) \, \left[\frac{|\tau_s|}{\tau_s^0}\right]^n \, sgn(\tau_s) \tag{II.19}$$

Avec :

$\dot{\gamma}_s^{\mathsf{vp}}$	vitesse de glissement (s)	$[s]^{-1}$
$\dot{\gamma}_0$	vitesse de glissement de référence	$[s]^{-1}$
ΔG	variation d'énergie entre les deux états	$[J]$
k_{b}	constante de Boltzmann	$[J].[K]^{-1}$
T	la température	$[K]$
τ_s	projection de la contrainte via le tenseur de Schmid	$[MPa]$
τ_s^0	contrainte seuil (s)	$[MPa]$

Il est possible de faire le même raisonnement pour le formalisme faisant intervenir des fonctions hyperboliques. Dans la suite seul le formalisme en loi puissance est discuté.

La dépendance à la vitesse de déformation dans la loi puissance est portée par l'exposant n. Néanmoins, il est possible d'identifier une loi de type Arrhénius en préfacteur d'une loi puissance. Lorsqu'un formalisme de ce type est pris (cf. Eq. II.19), il est clair qu'une variation de température induit une variation du préfacteur, à savoir $\dot{\gamma}_0\, exp\left(-\frac{\Delta G}{k_\mathsf{b} T}\right)$. Or si la simulation s'effectue à vitesse de déformation imposée, le préfacteur est constant. Ceci implique qu'une partie du préfacteur $\dot{\gamma}_0\, exp\left(-\frac{\Delta G}{k_\mathsf{b} T}\right)$ basculera dans la loi puissance. En d'autres termes, l'exposant n qui est censé porter uniquement la dépendance à la vitesse de déformation (dans ce formalisme), porte également et ce malgré lui, la dépendance à la température.

Pour cette raison, il pourrait paraître plus judicieux de faire intervenir la dépendance à la température directement dans la contrainte seuil $\boldsymbol{\tau}_s^0$.

Formalisme en loi puissance [**Knezevic et al. 2013**] :

$$\dot{\gamma}_s^{\mathsf{vp}} \propto \dot{\gamma}_0(\dot{\bar{\varepsilon}}) \left[\frac{|\boldsymbol{\tau}_s|}{\boldsymbol{\tau}_s^0(T,\dot{\bar{\varepsilon}})}\right]^n sgn(\boldsymbol{\tau}_s) \tag{II.20}$$

Le formalisme ci-dessus Eq. II.20 est repris des travaux de [**Knezevic et al. 2013**]. La première chose à remarquer est la prise en compte des paramètres de sollicitation, la température et la vitesse de déformation macroscopique, dans la loi d'évolution.

Avant de discuter du formalisme proposé, il est à rappeler que dans les travaux présentés par les auteurs, ceux-ci effectuent des essais d'écrouissage en balayant des gammes de sollicitation très importantes, notamment en vitesse de déformation.

Comme mentionné directement par les auteurs (cf. [**Knezevic et al. 2013**]), la prise en compte de la vitesse de déformation macroscopique dans la loi locale enlève à l'exposant n son rôle. Autrement dit, dans le formalisme Eq. II.20, l'exposant n ne porte pas la dépendance à la vitesse de déformation macroscopique. Cette dépendance est portée par le préfacteur $\dot{\gamma}_0(\dot{\bar{\varepsilon}})$ en même temps que la contrainte seuil $\boldsymbol{\tau}_s^0(T,\dot{\bar{\varepsilon}})$. Il est à noter que la contrainte seuil $\boldsymbol{\tau}_s^0(T,\dot{\bar{\varepsilon}})$ prend également en compte la dépendance à la température comme évoqué précédemment.

L'avantage principal de ce type de formulation, est que si le préfacteur $\dot{\gamma}_0(\dot{\bar{\varepsilon}})$ est judicieusement choisi, c'est-à-dire si $\frac{\dot{\gamma}_s^{\mathsf{vp}}}{\dot{\gamma}_0(\dot{\bar{\varepsilon}})} \sim 1$ alors la projection de la contrainte est proche de la contrainte seuil $\frac{|\boldsymbol{\tau}_s|}{\boldsymbol{\tau}_s^0(\dot{\bar{\varepsilon}})} \sim 1$. Enfin, cela permet d'avoir plus de liberté quant à la prise en compte de la vitesse de déformation macroscopique comparativement à la loi puissance classique, où cette dépendance est portée par le seul exposant n. De plus ce type de formulation facilite l'intégration numérique lorsque les gammes de sollicitation sont très larges en vitesse de déformation macroscopique et ou en température.

L'inconvénient majeur est que la dépendance à la vitesse est explicite. Cela se passe bien lorsque les essais envisagés sont des essais d'écrouissage à vitesse de déformation imposée. La vitesse de déformation est alors un paramètre de sollicitation connu. Par contre, s'il est envisagé un essai de fluage, il faudrait se poser la question de l'intégration numérique de la loi d'évolution et en particulier la détermination, à chaque pas de temps de la résolution, de la vitesse de déformation macroscopique $\dot{\bar{\varepsilon}}$.

II.3.2 Introduction du modèle d'ordre réduit NTFA

Les équations, associées au cas d'étude, sont développées dans le chapitre V, ici il n'est fait mention que des apports amenés par différents auteurs au cours du temps pour aboutir au modèle

d'ordre réduit NTFA actuel. Certaines équations sont introduites pour faciliter la lecture mais ces dernières ne sont pas toutes explicitées.

La sous section suivante a pour but d'introduire l'approche Non uniform Transformation Field Analysis (NTFA) qui fait partie de la classe des modèles d'ordre réduit. Un historique de la NTFA et de son développement au cours du temps sont présentés succinctement. La présentation se fait jusqu'à la forme actuelle du modèle qui permet de traiter différents comportements et ce sans varier l'approche.

Les comportements étudiés ici s'inscrivent dans le cadre de matériaux standard généralisés, cadre développé par **[Halphen et Son Nguyen 1975]**, cadre qui repose sur deux concepts. Le premier recouvre la notion de variables internes, et le second la notion de potentiels thermodynamiques, en particulier w l'énergie libre et ϕ le potentiel de dissipation. Un comportement élasto viscoplastique est pris en exemple. Il est fait l'hypothèse qu'il n'y a qu'une seule variable interne, le tenseur des déformations viscoplastiques. Les relations locales d'intérêt pour un comportement élasto viscoplastique s'inscrivant dans ce cadre sont résumés dans Eq. II.21.

Variables internes locales : $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}(\boldsymbol{x})$ Déformation viscoplastique,

Variable observable : $\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{x})$ Déformation totale.

$$w\left(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}, p\right) = \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}\right) : \boldsymbol{L} : \left(\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}\right)$$

Avec : w Énergie libre fonction des variables internes et de la déformation totale $\boldsymbol{\varepsilon}$.

$$\begin{aligned} \frac{\partial w}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} &= \boldsymbol{\sigma} \ \left(\equiv \boldsymbol{L} : \left(\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}\right)\right) \\ -\frac{\partial w}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}} &= \boldsymbol{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp}} \ \left(\equiv \boldsymbol{L} : \left(\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}\right)\right) \end{aligned} \tag{II.21}$$

Avec : $\boldsymbol{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp}}$ Force thermodynamique associée à la variable interne viscoplastique $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}$.

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathsf{vp}}(\boldsymbol{x}, t) = \frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp}}}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{x}, t))$$

Avec : $\psi(\boldsymbol{x})$ Potentiel de force local.

$$\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{x}, t) = \frac{\partial \varphi}{\partial \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathsf{vp}}}(\boldsymbol{x}, \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathsf{vp}}(\boldsymbol{x}, t))$$

Avec : $\varphi(\boldsymbol{x})$ Potentiel de dissipation local.
$\varphi^* = \psi$ $(* \equiv$ Conjugué)

Il est possible d'exprimer le tenseur des déformations totales (cf. Eq. II.23) solution du problème mécanique défini par Eq. II.21, à variables d'état fixées, équations locales appliquées sur un VER en ajoutant l'équation d'équilibre et des conditions de périodicité. Cette solution s'appuie sur le principe de superposition et la résolution de deux problèmes mécaniques « élémentaires ». Le premier consiste à résoudre un problème d'équilibre purement élastique, lorsque le tenseur des déformations viscoplastiques est pris nul (cf. Eq. II.22). Le deuxième consiste à résoudre un problème où la moyenne du tenseur des déformations est pris nul et lorsqu'une pré-déformation viscoplastique est imposée (cf. Eq. II.22 en considérant $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}(\boldsymbol{x}, t)$ comme une pré-déformation).

Problème élastique à déformation moyenne imposée : $\left\| \ \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}(\boldsymbol{x}) = \mathbf{0} \right.$

$$(\mathcal{P}) \begin{cases} div(\boldsymbol{\sigma}) = 0 & \text{dans } V \\ \boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{L} : \boldsymbol{\varepsilon}(u) & \text{dans } V \\ \boldsymbol{u} - \langle \boldsymbol{\varepsilon}(u) \rangle \cdot \boldsymbol{x} & \#\text{ sur } \partial V \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n} & \text{-}\#\text{ sur } \partial V \\ \langle \boldsymbol{\varepsilon}(u) \rangle = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \end{cases}$$

Problème avec pré-déformation imposée et moyenne nulle : $\left\| \begin{array}{l} \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}(\boldsymbol{x}, t) \\ \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{0} \end{array} \right.$

$$(\mathcal{P}) \begin{cases} div(\boldsymbol{\sigma}) = 0 & \text{dans } V \\ \boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{L} : (\boldsymbol{\varepsilon}(u) - \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}(\boldsymbol{x}, t)) & \text{dans } V \\ \boldsymbol{u} - \langle \boldsymbol{\varepsilon}(u) \rangle \cdot \boldsymbol{x} & \#\text{ sur } \partial V \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n} & \text{-}\#\text{ sur } \partial V \\ \langle \boldsymbol{\varepsilon}(u) \rangle = \mathbf{0} \end{cases}$$

(II.22)

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{x}, t) = \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}) : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(t) + \boldsymbol{D} * \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}(\boldsymbol{x}, t)$$

Avec :

$\boldsymbol{\varepsilon}$	Tenseur des déformations totales.
$\boldsymbol{A}$	Tenseur de localisation solution de Eq. II.22, problème élastique à déformation moyenne imposée.
$\boldsymbol{D} * \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}$	Tenseur d'influence solution de Eq. II.22. problème avec pré-déformation imposée et moyenne nulle.

$$\boldsymbol{D} * \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}(\boldsymbol{x}, t) = \frac{1}{|V|} \int_V \boldsymbol{D}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x'}) : \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}(\boldsymbol{x'}, t) \, \mathrm{d}\boldsymbol{x'}$$

Avec :

$\boldsymbol{D}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x'}) = \boldsymbol{\Gamma}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x'}) : \boldsymbol{L}(\boldsymbol{x'})$	Opérateur non local.
$\boldsymbol{\Gamma}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x'})$	Opérateur non local de Green.

(II.23)

Une des idées de [**Dvorak et Benveniste 1992 ; Dvorak 1992**], idée qui permet de traiter des comportements dérivant de deux potentiels, est de considérer le tenseur des déformations viscoplastique uniforme par morceaux. C'est-à-dire de morceler en plusieurs phases le VER et de considérer le tenseur des déformations viscoplastiques uniformes par phases $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}(\boldsymbol{x}, t) = \sum_r^M \xi_{\mathsf{vp}}^{(r)}(t) \, \chi^{(r)}(\boldsymbol{x})$ avec $\chi^{(r)}(\boldsymbol{x}) = 1$ si $\boldsymbol{x} \in r$ et 0 sinon. Ceci permet de séparer la partie spatiale de la partie temporelle de la variable interne considérée. La variable interne n'est plus qu'une combinaison linéaire d'un champ uniforme qui ne dépend plus du temps. En appliquant cette décomposition, l'expression du tenseur des déformations totale se simplifie.

Malheureusement, dans certains problèmes, le tenseur des déformations viscoplastiques est fortement dépendant de la variable spatiale $\boldsymbol{x}$ ce qui oblige à morceler en un grand nombre de phases M le VER considéré. Autrement dit, cela tend à traiter le problème initial. Il a également été vu que le modèle est relativement raide sur certains problèmes [**Michel et al. 2000 ; Chaboche et al. 2001**].

Pour ces raisons et en remarquant dans le cas des composites en deux dimensions l'allure du tenseur des déformations viscoplastiques, [**Michel et Suquet 2003**] ont proposé de décomposer le tenseur des déformations viscoplastiques non pas sur une base uniforme, mais sur des fonctions de formes appelés modes qui ne sont plus uniformes en espace. Ces modes supportent une certaine hétérogénéité du VER et sont à support par phase. En d'autres termes, ils sont hétérogènes dans une

phase considérée et nuls ailleurs. C'est ce que [**Largenton et al. 2014**] appellent « modes locaux ». Ceci est le fondement de la Nonuniform Transformation Field Analysis ou NTFA. Il est à remarquer que les modes sont associés aux variables internes et non pas au déplacement ou vitesse comme cela est classiquement le cas dans les modèles d'hyper réduction. Dans ces travaux, [**Michel et Suquet 2003**] considèrent un composite en deux dimensions avec un comportement qui peut être élastoplastique ou élasto viscoplastique. Ils s'appuient sur le principe de superposition évoqué précédemment pour aboutir à l'expression du tenseur des déformations sous l'hypothèse de la décomposition effectuée. Il est alors nécessaire d'expliciter le problème réduit à résoudre sur le VER. En particulier, les équations d'évolution doivent être précisées. Au choix, il est possible d'expliciter l'évolution des variables réduites, variables qui pondèrent les modes utilisés dans la décomposition, ou des forces réduites, force réduite thermodynamiquement associée au variable réduite. [**Michel et Suquet 2003**] s'appuient sur les relations constitutives effectives découlant de l'utilisation du cadre des Matériaux Standard Généralisés, et plus particulièrement de l'énergie libre effective, pour expliciter l'expression des forces thermodynamiques réduites associées aux variables réduites. Enfin, ils précisent les équations d'évolution de manière heuristique, en considérant un cas découplé et un cas couplé (cf. [**Michel et Suquet 2003**] pour plus de précisions). L'étape de construction des modes n'est pas totalement spécifiée.

Cette étape est explicitée plus tard par [**Roussette et al. 2009**], qui considèrent dans l'étude un composite en deux dimensions. La construction des modes est détaillée. Dans un premier temps, un certain nombre d'instantanés $\boldsymbol{\theta}_{\mathsf{vp}}^{(i)}$ sont relevées a posteriori de simulations en champ complet préalablement effectuées. Les instantanés sont confondus avec la variable interne décomposée à un certain instant de la simulation en champ complet, c'est-à-dire $\boldsymbol{\theta}_{\mathsf{vp}}^{(i)}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}(\boldsymbol{x}, t_i)$ à un certain instant t_i. Ils construisent ensuite une matrice de corrélation globale $\boldsymbol{g}$, avec $g_{ij} =< \boldsymbol{\theta}_{\mathsf{vp}}^{(i)}(\boldsymbol{x}) : \boldsymbol{\theta}_{\mathsf{vp}}^{(j)}(\boldsymbol{x}) >$. Enfin ils utilisent la Proper Orthogonal Decomposition (POD) pour déduire de cette matrice de corrélation la base modale à considérer. Pour ce faire, ils définissent un certain critère, critère qui s'apparente aux taux d'information restitué sur l'ensemble de l'information fournie, qu'ils utilisent pour ne considérer qu'un nombre réduit de valeurs propres issues de la décomposition, et par extension aux modes associés aux valeurs propres. Ils considèrent également un chargement non plus seulement uniaxé mais quelconque.

Pour répondre à l'approche heuristique dans l'établissement des lois d'évolution des forces thermodynamiques réduites proposée par [**Michel et Suquet 2003**] avec le modèle couplé, [**Fritzen et Leuschner 2013**] propose d'approximer le potentiel de dissipation effectif par la moyenne sur l'ensemble du VER des potentiels de dissipation locaux. Cette approximation permet d'aboutir de manière systématique aux relations d'évolution des forces réduites. Dans cette étude, les auteurs considèrent un VER en trois dimensions. Les temps de simulation obtenus par [**Fritzen et Leuschner 2013**], bien qu'inférieur au temps obtenu par des méthodes en champ complet, restent relativement importants.

Les travaux de [**Largenton et al. 2014**], auteurs qui considèrent un comportement viscoélastique linéaire vieillissant en trois dimensions, introduisent certaines idées concernant les modes, la prise en compte d'un chargement quelconque ainsi que des paramètres pouvant évoluer au cours du temps (aspect vieillissant). Dans un premier temps, [**Largenton et al. 2014**] proposent de définir les modes non plus par phases (modes locaux) mais sur l'ensemble du VER (modes globaux). Les modes supportent une certaine hétérogénéité à support sur l'ensemble du VER. Les comparaisons des résultats issus des modèles réduits NTFA considérant des modes locaux et globaux ne différent que très peu, aussi bien à l'échelle macroscopique que locale. Ceci permet de réduire radicalement le nombre de variables internes dans le système et ainsi de diminuer le temps de calcul. Dans la suite, les modes sont définis sur l'ensemble du VER (modes globaux). Pour ce qui est du traitement d'un chargement quelconque, [**Largenton et al. 2014**] proposent de construire une base modale par application de la POD sur des chargements élémentaires puis d'effectuer un second POD pour en déduire la base modale finale. La base modale finale est un certain mélange avec sélection des bases modales élémentaires. Les résultats sont plutôt satisfaisants dans le cas d'un comportement

viscoélastique linéaire. Enfin, pour intégrer l'aspect vieillissant, les auteurs intègrent dans leur base modale des modes issus de chargements effectués à l'instant final et à l'instant initial. Ceci semble suffisant pour couvrir l'ensemble de la simulation.

Toujours dans l'optique de réduire le temps de calcul et notamment pour les comportement non linéaires, [**Michel et Suquet 2016a**] proposent avec des modes globaux une nouvelle approximation s'inscrivant dans la suite des travaux de [**Fritzen et Leuschner 2013**] et qui consiste à développer à l'ordre deux le potentiel de dissipation effectif autour d'un certain point de fonctionnement. Le point de fonctionnement est la moyenne des variables thermodynamiques par phase. Ce développement à l'ordre deux, appelé ici Tangent Second Order (TSO), s'inspire des travaux de [**Castañeda 1996**] et en particulier de la linéarisation à l'ordre deux du potentiel. Ce développement permet de réduire radicalement le temps de calcul par rapport à ceux qui se limiteraient à l'approximation introduite par [**Fritzen et Leuschner 2013**]. Au passage, les auteurs précisent que l'approximation introduite par [**Fritzen et Leuschner 2013**], bien que permettant de traiter différents problèmes de manière systématique, change la limite supérieure de l'approche variationnelle. Celle-ci (avec l'approximation faite) converge vers la première (sans approximation) lorsque suffisamment de modes sont considérés. Ils montrent aussi que les lois d'évolution heuristiques, loi proposées dans [**Michel et Suquet 2003**], peuvent être retrouvées en utilisant une approche de type sécante modifiée. Et enfin, ils généralisent au cas non linéaire la considération de modes définis sur l'ensemble du VER (modes globaux).

Les deux derniers travaux étudiés, [**Michel et Suquet 2016b ; Michel et Suquet 2017**] étendent le modèle d'ordre réduit NTFA au cas polycristallin. Dans les premiers travaux, [**Michel et Suquet 2016b**] utilisent l'ensemble des avancées réalisées. Cela passe par la décomposition des variables internes propre à la NTFA en considérant en plus du tenseur des déformations viscoplastiques un écrouissage. Puis, par la construction des modes définis sur l'ensemble du VER [**Largenton et al. 2014 ; Michel et Suquet 2016a**] en s'appuyant sur une relève uniforme des instantanées et l'utilisation de la POD [**Roussette et al. 2009 ; Michel et Suquet 2010**]. Par suite, par l'utilisation des relations effectives découlant du cadre des MSG, en reprenant l'hypothèse introduite par [**Fritzen et Leuschner 2013**] qui consiste à approximer le potentiel de dissipation effectif par la moyenne sur l'ensemble du VER des potentiels de dissipation locaux. Enfin par la linéarisation TSO [**Michel et Suquet 2016a**] du potentiel de dissipation effectif pour établir les lois d'évolution des forces thermodynamiques réduites. Les derniers travaux [**Michel et Suquet 2017**] différent de [**Michel et Suquet 2016b**] dans la linéarisation considérée. L'approche TSO est remplacé par une méthode de quadrature pour calculer le potentiel de dissipations effectif.

Deuxième partie

Approche en champ complet – Modélisation et validation (FEM et FFT vs Expérience) du comportement mono et polycristallin de l'UO_2 en condition accidentelle RIA.

Chapitre III

Modélisation et validation (FEM vs Expérience) du comportement monocristallin de l'UO_2 en condition accidentelle RIA.

III.1 Contexte expérimental et contexte de simulation

La calibration et la validation de la loi monocristalline se fait par rapport aux essais expérimentaux de [**Sawbridge et Sykes 1971**] et également de [**Byron 1968a ; Mordike 1976**] : ces essais expérimentaux n'ayant pas été utilisés par les auteurs cités précédemment dans le chapitre II. Les caractéristiques des deux expériences, d'une part [**Sawbridge et Sykes 1971**] et d'autre part [**Byron 1968a ; Mordike 1976**] sont présentées et détaillées. Il s'en suit la présentation de la simulation numérique permettant de s'approcher des conditions expérimentales des différents auteurs. À noter qu'une étude de sensibilité au maillage a été conduite et ce avant de calibrer et valider la loi monocristalline.

III.1.1 Contexte expérimental

Au-delà de la géométrie du matériau (cf. Fig. III.1), les différents expérimentateurs utilisent plusieurs orientations (il est fait mention ici de l'orientation de l'axe de compression : essai de compression uniaxé). Ces orientations sont reprises par la figure de pôle inverse suivante Fig. III.2.

Deux angles servent à définir l'orientation de l'axe de compression. Ces deux angles sont définis dans l'étude expérimentale de [**Sawbridge et Sykes 1971**]. Pour effectuer la simulation numérique, il est possible de travailler au choix sur l'orientation de l'axe de compression lui-même ou sur l'orientation du réseau cristallin (orientation du réseau défini par 2 axes principaux : le dernier axe se déduit des deux premiers). Les angles sont opposés entre un travail sur la rotation du réseau cristallin et un travail sur l'orientation de l'axe de compression. Le choix a été fait de se tourner vers l'orientation du réseau cristallin. Ceci est à rapprocher des stratifiés et de la rotation de la matrice d'élasticité. Il est à rappeler que, dans le cas d'étude, les comportements élastique et visco-plastique sont anisotropes. L'anisotropie visco-plastique est due à la présence des plans de glissement et de la différence des contraintes permettant de glisser sur ces plans de glissement. Afin de définir les deux angles utilisés que sont les angles (ϕ, Ω), il est nécessaire de définir un troisième angle θ.

Typiquement, deux angles sont définis pour orienter convenablement les axes principaux du réseau cristallin : d'une part l'angle θ qui est une rotation du repère cristallin autour de l'axe $< 001 >$ (axe z Fig. III.3) et d'autre part l'angle ϕ qui est une rotation du repère cristallin autour de l'angle $< 100 >$ (axe x Fig. III.3, attention l'axe x a subi au préalable la rotation d'angle θ). Ces deux rotations successives permettent de retrouver les deux directions de sollicitation. La direction définie

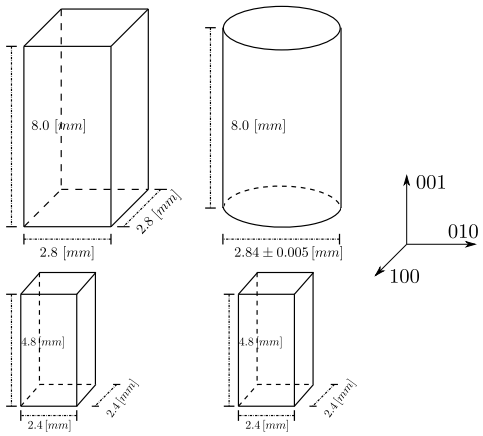
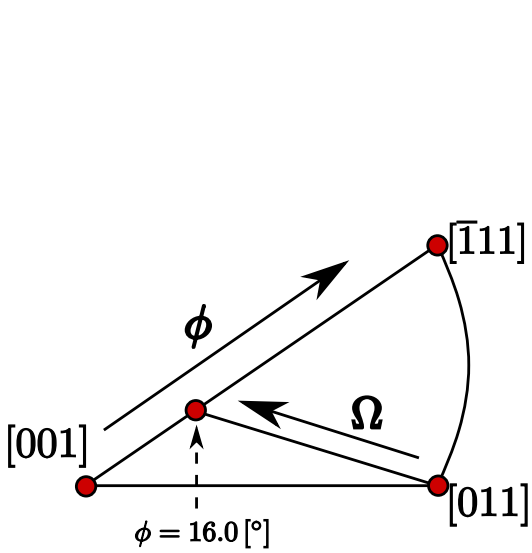
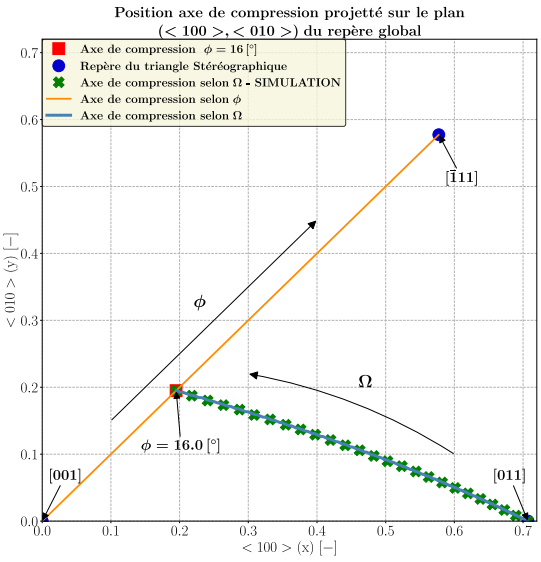


FIGURE III.1 – Géométrie de l'échantillon.
En haut à gauche : Parallélépipède étudié lors des simulations numériques pour les simulations de [**Sawbridge et Sykes 1971**].
En haut à droite : Cylindre issu de l'expérimental de [**Sawbridge et Sykes 1971**].
En bas à gauche : Parallélépipède étudié lors des simulations numériques pour les simulations de [**Byron 1968a ; Mordike 1976**].
En bas à droite : Parallélépipède issu de l'expérimental de [**Byron 1968a ; Mordike 1976**].



(a) Présentation schématique des directions de l'axe de compression.



(b) Construction numérique des directions de l'axe de compression.

FIGURE III.2 – Figures de pôles inverses représentant les deux directions de l'axe de compression utilisées dans l'étude expérimentale de [**Sawbridge et Sykes 1971**] et par rapprochement [**Byron 1968a ; Mordike 1976**].

par l'angle ϕ (Fig. III.2), est obtenue par rotation d'un angle $\theta = 45\,[°]$ et d'un angle ϕ (avec ϕ, l'angle compris entre [001] et [$\bar{1}$11] cf. Fig. III.2). De manière analogue et en choisissant correctement le couple (θ, ϕ), il est possible de retrouver l'angle $\Omega = f(\theta, \phi)$ (cf. Fig. III.2, avec Ω angle compris entre la direction [011] et la direction définie par $\phi = 16.0\,[°]$).

III.1.1.1 Caractéristiques des essais expérimentaux : [Sawbridge et Sykes 1971]

[**Sawbridge et Sykes 1971**] présentent la spécificité de balayer un grand nombre de directions de compression. Les caractéristiques des essais de [**Sawbridge et Sykes 1971**] sont les suivantes :

- ♢ Vitesse de déformation $\dot{\bar{\varepsilon}}_{33} = 1.0 \times 10^{-4}\,[s]^{-1}$.
- ♢ Dimensions $\varnothing = 2.84 \pm 0.005\,[mm]\ \times\ h = 8.0\,[mm]$ (cf. Fig. III.1 figures du haut).
- ♢ Stoechiométrie $\chi \sim 2.001\,[-]$.
- ♢ Température $T = 1600.0\,[K]$.
- ♢ [**Sawbridge et Sykes 1971**] définissent et utilisent pleinement les deux directions de compression définies par les angles ϕ et Ω (cf. Fig. III.2).

Les auteurs fournissent une partie des courbes contraintes-déformations ainsi que les contraintes d'écoulement (contraintes calculées pour une déformation effective : $\bar{\sigma}_{33}|\bar{\varepsilon}_{33} = 2\%$) sur les deux directions balayées par l'axe de compression. [**Sawbridge et Sykes 1971**] travaillent à température fixe mais balaie un nombre conséquent d'orientations.

III.1.1.2 Caractéristiques des essais expérimentaux : [Byron 1968a ; Mordike 1976]

Ces deux auteurs, [**Byron 1968a ; Mordike 1976**], présentent la spécificité de réaliser les mêmes essais. Plus précisément, plusieurs paramètres de leurs essais sont les mêmes à savoir : la géométrie de l'échantillon testée (parallélépipède rectangle de dimensions : $2.4 \times 2.4 \times 4.8\,[mm]^3$), le domaine de températures balayé (sensiblement le même), les mêmes orientations de l'axe de compression (les deux auteurs utilisent 3 orientations différentes), les échantillons proviennent du même batch de fabrication, il peut être supposé qu'ils ont la même microstructure et en particulier les mêmes impuretés de fabrication. Ce qui différencie les essais de [**Byron 1968a ; Mordike 1976**] est que le dernier auteur juge que la stoechiométrie n'est pas bien contrôlée lors des essais expérimentaux de [**Byron 1968a**]. [**Mordike 1976**] décide alors de rejouer entièrement la campagne d'essais. Avoir deux auteurs réalisant les mêmes expériences est un luxe. D'une part il est possible de voir l'impact de la stoechiométrie. D'autre part, le fait d'avoir deux auteurs permet d'avoir une estimation de l'erreur de leurs mesures. Enfin, la dernière chose intéressante est que ces deux auteurs balaient une large gamme de températures, balayage qui est très intéressant car l'accident d'insertion de réactivité (RIA) balaie également une large gamme de températures au cours du transitoire et suivant les zones radiale et axiale considérées de la pastille.

Le point regrettable est que ces derniers ne sollicitent pas l'échantillon sur plus de trois orientations. Ces trois orientations, ne sollicitent principalement que la famille {100} (en théorie).

Les caractéristiques des essais de [**Byron 1968a ; Mordike 1976**] sont les suivantes :

- ♢ Vitesse de déformation $\dot{\bar{\varepsilon}}_{33} = 3.33 \times 10^{-4}\,[s]^{-1}$.
- ♢ Dimensions $2.4 \times 2.4 \times 4.8\,[mm]^3$ (cf. Fig. III.1 figures du bas).
- ♢ Stoechiométrie $\chi \sim 2.001\,[-]$ [**Byron 1968a**] et $\chi = 2.001\,[-]$ [**Mordike 1976**].
- ♢ Température $T \in [600,\ 1900]\,[°C]$.
- ♢ Trois orientations approximées via les angles de [**Sawbridge et Sykes 1971**] (cf. Fig. III.2) : Orientation (1) $\Omega = 4.2\,[°]$, Orientation (2) $\phi = 50.3\,[°]$, Orientation (3) $\Omega = 26.9\,[°]$. L'orientation (2) permet d'obtenir la contrainte résolue de cisaillement critique de la famille {100}.

Les auteurs fournissent les courbes complètes des contraintes en fonction des déformations ($\bar{\sigma} = f(\bar{\varepsilon})$) en fonction des orientations et de la température.

III.1.2 Rappel du problème d'intérêt et du formalisme des lois utilisées

Le problème d'intérêt est décrit par l'équation Eq. III.1. Il est à rappeler que le mécanisme induisant la déformation viscoplastique retenu est le mécanisme de franchissement de la barrière de

Peierls [**Peierls 1940**] (éventuellement par double décrochement [**Seeger 1956**]). Ce franchissement nécessite une certaine quantité d'énergie, quantité d'énergie qui peut être apportée mécaniquement et ou thermiquement. Il est communément admis que l'apport d'énergie permettant le franchissement de la barrière de Peierls [**Peierls 1940**] provient d'une énergie gardant le couplage entre les phénomènes mécanique et thermique.

$$(\mathcal{P}) \begin{cases} div(\boldsymbol{\sigma}) = 0 & \text{dans V} \\ \boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{L} : \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{e}}(u),\ \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{e}}(u) = \boldsymbol{\varepsilon}(u) - \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}(u) & \text{dans V} \\ \langle \boldsymbol{\varepsilon}(u) \rangle = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} & \\ \text{Conditions de bords à définir} & \end{cases}$$

Avec :
- $\boldsymbol{\varepsilon}$ Tenseur des déformations totales.
- $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{e}}$ Tenseur des déformations élastiques.
- $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}$ Tenseur des déformations visco-plastiques.
- $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}} = \sum_s \gamma_s \boldsymbol{m_s}$

Et :
- $\boldsymbol{m_s} = \boldsymbol{b_s} \otimes \boldsymbol{n_s}$ Tenseur de Schmid du système s.
- $\boldsymbol{n_s}$ Normale au plan de glissement du système s.
- $\boldsymbol{b_s}$ Direction othogonale à la ligne de dislocation engendrant le plan de glissement du système s.
- γ_s Cisaillement propre au système s.

De plus :
- V Le volume du matériau considéré. $[m]^3$
- $\boldsymbol{\sigma}$ Le tenseur des contraintes. $[MPa]$
- $\langle \cdot \rangle$ L'opérateur moyenne.

En complément : $\langle \cdot \rangle = \frac{1}{|V|} \int_V \cdot \, \mathrm{d}V$

(III.1)

Les deux formalismes des lois de comportement utilisées et présentées dans les parties précédentes (cf. II.2.2 Approche micromécanique en champ complet), formalismes largement utilisés dans les travaux de thèses de [**Soulacroix 2014 ; Pacull 2011**] puis [**Portelette 2018**], sont repris et décrits en premier lieu par Eq. III.2 puis en second lieu par Eq. III.3.

$$\dot{\gamma}_s = \rho_s^{\mathsf{m}} \times b \times \nu_s$$

$$\nu_s = \nu_D \times b \times exp\left(-\frac{\Delta H_i^0}{k_{\mathsf{b}} T}\right)\left[CosH\left(\frac{\boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{m_s}}{\tau_i^0}\right) - 1\right] \times sgn(\tau_s)$$

Avec :

ΔH_i^0	Barrière d'énergie de la famille i du système s.	$[eV]$	
τ_i^0	Contrainte critique seuil de la famille i que doit dépasser la contrainte résolue τ_s du système s.	$[MPa]$	
$\tau_s = \boldsymbol{M} : \boldsymbol{m_s}$	$\boldsymbol{m_s}$ Tenseur de Schmid du système (s) $\boldsymbol{M}$ Tenseur de Mandel		(III.2)
$\boldsymbol{M} = (\boldsymbol{F}_{\mathsf{e}})^T \cdot \boldsymbol{F}_{\mathsf{e}} \cdot \boldsymbol{\Pi}$	$\boldsymbol{F}_{\mathsf{e}}$ Transformation élastique $\boldsymbol{\Pi}$ Tenseur de Piola-Kirschhoff		
$b = \frac{a_0}{\sqrt{2}}$	Norme du vecteur de Burgers.	$[m]$	
ρ_s^{m}	Densité de ligne de dislocations sur le système s.	$[m]^{-2}$	

Où :

$\nu_D = 4.94 \times 10^{13}$	Fréquence de Debye	$[s]^{-1}$
$a_0 = 5.47$	Paramètre de maille	$[\mathring{A}]$

Comme évoqué dans la partie précédente, le premier formalisme, où formalisme de la loi nommée CosH décrit par Eq. III.2, découple la mécanique de la thermique. En d'autres termes et ce malgré la remarque précédente, l'énergie permettant le franchissement de la barrière de Peierls **[Peierls 1940]** provient de la somme de deux énergies à savoir une énergie thermique et une énergie mécanique. La formulation avec la fonction en CosH permettrait de couvrir une large gamme de contraintes.

$$\dot{\gamma}_s = \rho_s^{\mathsf{m}} \times b \times \nu_s$$

$$\nu_s = \nu_D \times b \times exp\left(-\frac{\Delta H(\tau_s)}{k_{\mathsf{b}} T}\right) \times sgn(\tau_s)$$

Avec : $\Delta H(\tau_s) = \Delta H_i^0 \times \left[1 - \left(\frac{|\tau_s|}{\tau_i^P}\right)^p\right]^q$

Et :

$i \in \{\{100\}, \{110\}, \{111\}\}$	i, Propre à chacune des familles.		
ΔH_i^0	Barrière d'énergie à contrainte nulle de la famille i du système s.	$[eV]$	(III.3)
τ_i^P	Contrainte critique de Peierls de la famille i que doit dépasser la contrainte résolue τ_s du système s.	$[MPa]$	
ρ_s^{m}	Densité de ligne de dislocations sur le système s.	$[m]^{-2}$	
De plus : $p \in [0.5, 1]$, $q \in [1, 2]$	**[Kocks et al. 1975]** **[Frost et Ashby 1982]**		

Comme évoqué dans la partie précédente, le deuxième formalisme, décrit Eq. III.3, se veut quant à lui plus physique que le précédent dans le sens où le couplage mécanique-thermique est gardé. Les coefficients de Eq. III.3 ont un sens plus physique que ceux utilisés Eq. III.2. Le formalisme de la loi

double décrochement (loi nommée DD) est pris impair afin de respecter la parité du formalisme de la loi en CosH. Ceci se justifie en considérant qu'à même contrainte, positive ou négative, la déformation visco-plastique générée est la même au signe près.

III.1.3 Présentation de la simulation

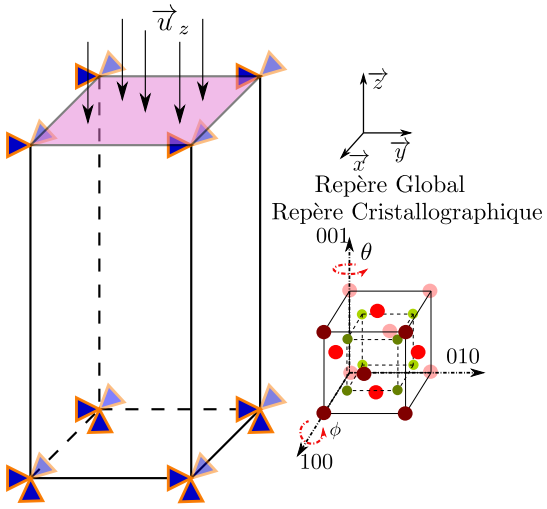


FIGURE III.3 – Illustration des conditions de simulation.

La simulation numérique s'effectue sur CAST3M [**CEA 2020**] avec les éléments CU20 (20 noeuds - 27 points d'intégrations)*. Pour ce qui est du contexte de résolution, les simulations numériques ont été effectuées sous l'hypothèse des grandes déformations (GD). La géométrie de l'éprouvette de simulation est quant à elle illustrée Fig. III.1. Les dimensions de cette éprouvette sont spécifiques à l'étude expérimentale sur laquelle la comparaison numérique est faite (cf. Fig. III.1).

Pour ce qui est du chargement et des conditions aux limites, ces deux derniers sont illustrés Fig. III.3.

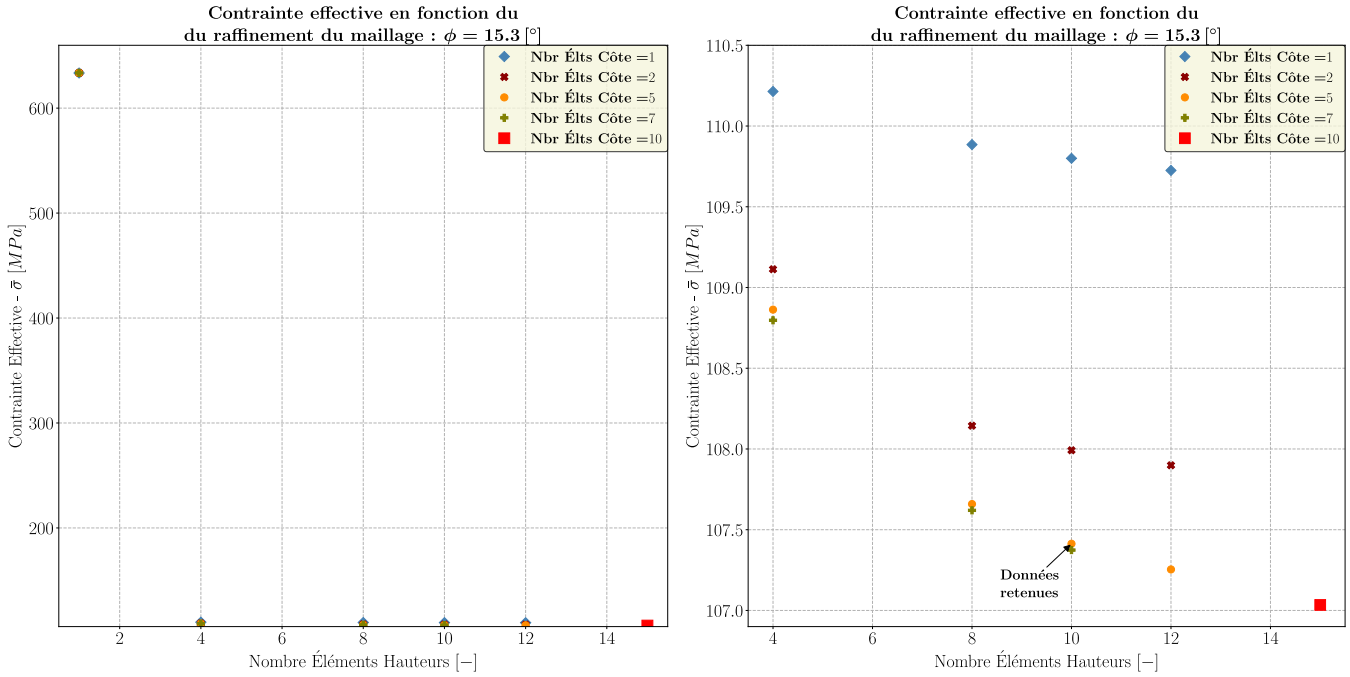
- ♢ Les conditions de blocage sont les suivantes :
  - ▶ Surface du bas : BLOCAGE du déplacement des noeuds dans trois directions - $U_X\, U_Y\, U_Z$.
  - ▶ Surface du haut : BLOCAGE du déplacement des noeuds dans deux directions - $U_X\, U_Y$.
- ♢ Les conditions de chargement sont les suivantes :
  - ▶ Déplacement imposé à la surface du haut (cf. Fig. III.3 surface violette). Le déplacement U_Z est tel que l'échantillon atteindra une déformation macroscopique de $\bar{\varepsilon}_{33} = 2\%$, déformation atteinte pour le temps final de simulation. Ceci correspond à une vitesse de déformation de $\dot{\bar{\varepsilon}}_{33} = 10^{-4}\,[s]^{-1}$ imposée uniquement à la surface du haut de l'échantillon (la vitesse de déformation est adaptée suivant l'étude expérimentale : Pour rappel $\dot{\varepsilon}_{33} = 10^{-4}\,[s]^{-1}$ [**Sawbridge et Sykes 1971**] et $\dot{\varepsilon}_{33} = 3.33 \times 10^{-4}\,[s]^{-1}$ [**Byron 1968a ; Mordike 1976**]).

La récupération et le post traitement des données s'effectuent comme suit. La force de réaction RF_Z a été relevée sur l'ensemble des noeuds de la surface supérieure. Ces dernières ont ensuite été sommées. Enfin pour obtenir la contrainte effective $\bar{\sigma}_{33}$, cette force de réaction totale a été divisée par la surface initiale S_0 et ce même sous l'hypothèse des grandes déformations (surface colorée en violet

∗. La littérature souligne qu'il est possible de rencontrer des problèmes d'incompressibilité numérique en utilisant des éléments « massifs » (20 noeuds - 27 points d'intégrations) avec une loi visco-plastique parfaite (loi de visco-plasticité constituée uniquement de tenseurs déviatoriques). Une étude (cf. Annexe C) a été menée pour s'assurer que la réponse effective est correcte.

cf. Fig. III.3) : $\bar{\sigma}_{33} = \dfrac{RF_{Tot_Z}}{S_0}$. La déformation effective a été calculée en utilisant le déplacement de la surface du haut divisé par la hauteur de l'éprouvette : $\bar{\varepsilon}_{33} = \dfrac{u_Z}{h}$.

III.1.4 Convergence au maillage



(a) Vue de l'ensemble des données.

(b) Zoom sur une partie des données.

FIGURE III.4 – Contrainte effective en fonction du nombre d'éléments pris dans la hauteur et sur la cote de l'éprouvette.

Une étude de convergence au maillage a été réalisée pour une certaine orientation de l'axe de compression, orientation définie par un angle $\phi = 15.3\,[°]$ (cf. Fig. III.2). L'éprouvette numérique étudiée est issue des travaux expérimentaux de **[Byron 1968a ; Mordike 1976]** (cf. Fig. III.1 pour les dimensions des éprouvettes). Le rapport hauteur sur cote est plus pénalisant pour les deux premiers auteurs comparativement à **[Sawbridge et Sykes 1971]** (plus pénalisant pour les effets de bords et notamment les blocages dans les directions U_X, U_Y des surfaces basse et haute cf. Fig. III.3 engendrant un chargement non homogène).

L'étude porte sur le nombre d'éléments pris dans la hauteur de l'éprouvette (direction z) et le nombre d'éléments pris sur la cote de l'éprouvette (directions x et y cf. Fig. III.3). L'étude portera uniquement sur la contrainte effective ($\bar{\sigma}_{33}$).

Les résultats sont regroupés sur les figures Fig. III.4 et plus particulièrement la figure Fig. III.4-(b). Lorsque le nombre d'éléments pris dans la hauteur et/ou dans la cote de l'éprouvette augmente, la contrainte effective ($\bar{\sigma}_{33}$) diminue jusqu'à atteindre une valeur limite. Le nombre d'éléments retenu dans la cote est de 5 et le nombre d'éléments retenu dans la hauteur est de 10. Au total l'éprouvette numérique comporte 250 éléments CU20 et ce pour toutes les simulations numériques qui seront présentées dans la suite.

Il existe un écart de contrainte effective entre la simulation effectuée avec $\{n_c = 10, n_h = 15\}$, où n_c est le nombre d'éléments dans la cote et n_h est le nombre d'éléments dans la hauteur, et la simulation retenue $\{n_c = 5, n_h = 10\}$. À titre d'indication, l'écart relatif ($\Delta = \frac{\bar{\sigma}_{33-\{n_c=5,n_h=10\}} - \bar{\sigma}_{33-\{n_c=10,n_h=15\}}}{\bar{\sigma}_{33-\{n_c=10,n_h=15\}}}$) est de l'ordre de : $\Delta = \frac{107.413-107.034}{107.034} \sim 0.35\,[\%]$, soit un écart relatif de moins de 1 [%].

III.2 Données expérimentales

Dans un premier temps, les données expérimentales permettant la détermination numérique des coefficients intervenant dans la loi d'évolution (à savoir $\{\tau_i^0,\ \Delta H_i^0,\ \rho_s^{\mathrm{m}}\}$ pour le formalisme en CosH cf. Eq. III.2 et $\{p_i,\ q_i\}$ pour le formalisme DD cf. Eq. III.3) sont présentées. Ces données, qui représentent l'évolution de la contrainte résolue de cisaillement critique (CRSS) en fonction de la température, dépendent de la famille de glissement considérée. Étant donné qu'il n'existe pas de données à ce jour concernant la famille {111}, seules les données des deux autres familles ({100}, {110}) sont présentées.

Dans un deuxième temps, les données expérimentales permettant la comparaison avec les résultats obtenus numériquement suite à la calibration sont présentées. Les données sont les contraintes effectives prises pour un certain taux de déformation.

Avant de présenter les données expérimentales retenues, il est bon de souligner et rappeler les quelques limites de ces études expérimentales :

- ♢ Les données concernant la famille {111} sont inexistantes. Étant donné que cette famille n'est pas observée seule, il est impossible de respecter les hypothèses de travail choisies et explicitées dans la sous-partie suivante (cf. Eq. III.4). Seul **[Sawbridge et Sykes 1971]** explicite une valeur potentielle de la contrainte résolue de cisaillement critique de cette famille à une température donnée.
- ♢ L'accident d'insertion de réactivité fait intervenir une vitesse de déformation de l'ordre de $\dot{\bar{\varepsilon}} \in [10^{-1}, 10]\,[s]^{-1}$. Cette gamme de vitesses de déformation est bien supérieure (facteur 10^3 au moins) aux vitesses de déformation appliquées dans les différents essais expérimentaux sur laquelle se base la calibration. En effet les auteurs ne sollicitent les échantillons qu'à des vitesses de déformation de l'ordre de $\dot{\bar{\varepsilon}} \sim 10^{-4}\,[s]^{-1}$.
- ♢ Au-delà d'avoir une vitesse de déformation se rapprochant de la gamme de sollicitation envisagée, les contraintes résolues de cisaillement critique des différentes familles sont sensibles à la variation des vitesses de déformation. Cette variation est étudiée en partie par **[Lefebvre 1977]** mais les données de ce dernier ne sont pas retenues : les raisons de ce choix sont explicitées en parties III.2.1.1 et III.2.1.2. Il aurait été souhaitable d'avoir une tendance vis-à-vis de la variation de ce paramètre afin de pouvoir étudier la sensibilité des différentes lois.
- ♢ Les auteurs n'explicitent pas toujours l'ensemble des paramètres expérimentaux. Ceci ne permet pas de correctement recouper les différentes études expérimentales et notamment d'expliquer les écarts importants qu'il peut y avoir.
- ♢ Des incohérences dans la comparaison de certaines études ont été relevées. Au vu du dernier point il est difficile de trancher pour l'une ou l'autre des études expérimentales.

La section suivante se base sur les travaux de **[Nadeau 1969]**, **[Sawbridge et Sykes 1971]**, **[Lefebvre 1977]**, **[Alamo et al. 1978]**, **[Frazer et Hosemann 2019]**, **[Byron 1968a]** et **[Mordike 1976]**. Ces auteurs fournissent des données expérimentales permettant de déduire les contraintes résolues de cisaillement critique de certaines familles. En particulier leurs travaux permettent d'avoir la variation de ces dernières en fonction de la température. Ce dernier point est essentiel étant donné que l'accident d'insertion de réactivité balaie une gamme de températures conséquente.

Ces contraintes résolues de cisaillement critique sont propres à chacune des 3 familles, familles qui regroupent l'ensemble des systèmes de glissement du dioxyde d'uranium. Des 3 familles du dioxyde d'uranium que sont la famille {100}, la famille {110} et la famille {111}, seules les deux premières sont traitées par les auteurs expérimentaux. La dernière famille est très problématique car celle-ci ne s'active jamais majoritairement. Il n'est donc pas possible d'obtenir la contrainte résolue de cisaillement critique de cette dernière.

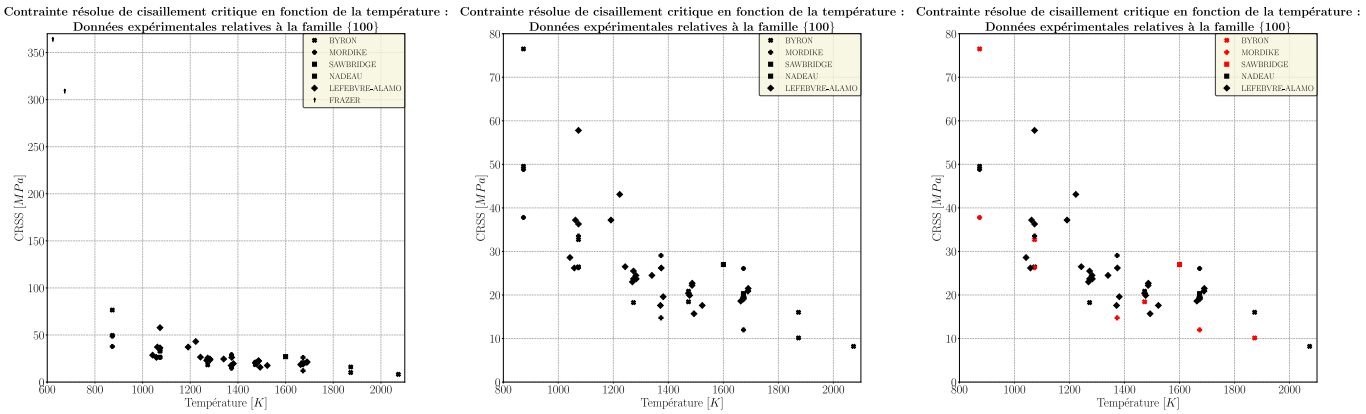
III.2.1 Données expérimentales de la famille {100}

Les données de contraintes résolues de cisaillement critique de la famille {100} en fonction de la température sont regroupées Fig. III.5-(a). Cette dernière figure se base sur les articles de [**Frazer et Hosemann 2019**], [**Byron 1968a**], [**Mordike 1976**], [**Sawbridge et Sykes 1971**], [**Nadeau 1969**], [**Lefebvre 1977**], [**Alamo et al. 1978**]. Attention, l'ensemble des données ne respectent pas les hypothèses de travail retenues (cf. Eq. III.4).

Par exemple, [**Alamo et al. 1978 ; Lefebvre 1977**] observent, pour une partie de leurs données, du glissement double.

Également, il apparaît suite aux premières simulations que seules quelques orientations particulières de l'axe de compression mobilisent majoritairement une famille en particulier.

Pour une contrainte effective mesurée à $\bar{\varepsilon} = 2\%$ (certains auteurs ne fournissent que la contrainte effective mesurée à 2% de déformation, par application du facteur de Schmid, facteur qui est fonction de l'orientation de l'axe de compression retenu, il est déduit la CRSS), l'hypothèse ($\mathcal{H}_1$) de Eq. III.4 n'est pas respectée. Ceci est vrai pour les essais expérimentaux de [**Byron 1968a ; Mordike 1976**].



(a) Ensemble des données. (b) Les données de Frazer sont écartées. (c) En rouge les données retenues.

FIGURE III.5 – Contraintes résolues de cisaillement critique relatives à la famille {100} en fonction de la température : Réduction des données.

La première des choses à noter concernant Fig. III.5-(a) est la rupture de tendance à basse température entre les mesures fournies par [**Frazer et Hosemann 2019**] et les autres auteurs. L'étude de [**Frazer et Hosemann 2019**] est particulière dans le sens où ils effectuent des essais de compression sur micro pilier. Comme explicité dans leur étude, ces micro piliers peuvent présenter des problèmes de représentativité notamment vis-à-vis des impuretés de fabrication. Pour avoir les idées claires sur ce point il aurait été souhaitable d'avoir les données de [**Frazer et Hosemann 2019**] sur une des températures retenues par un des autres auteurs, i.e. à moyenne ou à haute température. S'il y a bien une rupture de tendance, ce point n'est pas obligatoirement problématique. D'une part le matériau polycristallin n'exhibe de la déformation visco plastique qu'à partir d'une certaine température : $T > 1000\,[°C]$. La loi de plasticité cristalline doit donc être calibrée de préférence sur une gamme de température de l'ordre de $T \in [1000, 2300]\,[°C]$. D'autre part, il est possible d'utiliser une loi de plasticité cristalline définie par morceaux afin de concilier le domaine des basses températures avec le domaine des hautes températures. Pour ces deux raisons évoquées, à savoir le manque potentiel de représentativité et la possible rupture de tendance, les données de [**Frazer et Hosemann 2019**] sont écartées des mesures expérimentales. L'ensemble des mesures expérimentales retenues est alors regroupé Fig. III.5-(b) .

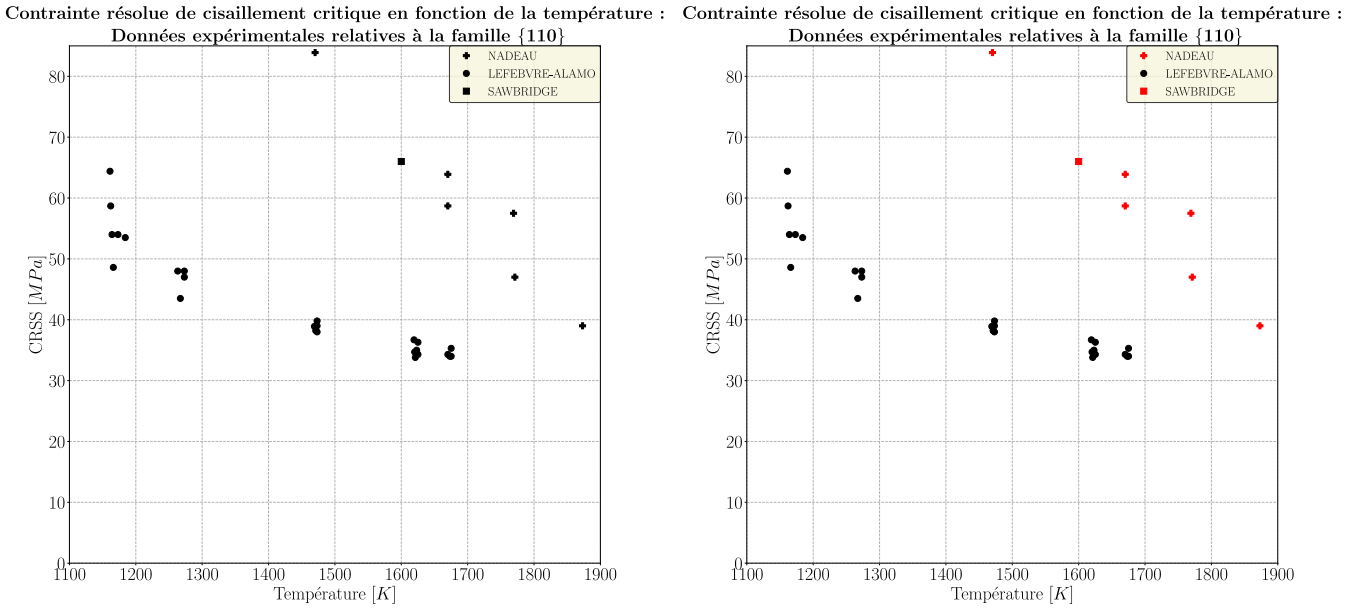
La deuxième chose est qu'il est souhaitable de retenir seulement les données expérimentales qui respectent les hypothèses de travail Eq. III.4. De ce fait, une partie des données de [**Byron 1968a**], [**Mordike 1976**], les données de [**Lefebvre 1977**], [**Alamo et al. 1978**] et celles de [**Nadeau 1969**] sur cette famille est écartée. Les contraintes effectives de [**Byron 1968a**], [**Mordike 1976**]

sont également prises pour $\bar{\varepsilon} = 4\%$ et ce afin de respecter l'hypothèse ($\mathcal{H}_1$) de Eq. III.4. De ces contraintes effectives sont déduites les contraintes résolues de cisaillement critique en appliquant le facteur de Schmid.

Finalement les données expérimentales concernant la famille {100} sur lesquelles sont calibrés les différents paramètres des deux lois sont regroupées Fig. III.5-(c) (données en rouge).

III.2.2 Données expérimentales de la famille {110}

Les données de contraintes résolues de cisaillement critiques de la famille {110} en fonction de la température sont regroupées Fig. III.6-(a). Cette dernière figure se base sur les articles de [**Sawbridge et Sykes 1971**], [**Nadeau 1969**], [**Lefebvre 1977**], [**Alamo et al. 1978**]. De la même manière, l'ensemble des données présentées ne respectent pas les hypothèses de travail retenues Eq. III.4.



(a) Ensemble des données expérimentales.

(b) En rouge les données retenues.

FIGURE III.6 – Contraintes résolues de cisaillement critique relatives à la famille {110} en fonction de la température : Réduction des données.

Il semblerait y avoir deux tendances pour cette famille (cf. Fig. III.6-(a)). L'une est déduite des données de [**Lefebvre 1977 ; Alamo et al. 1978**], l'autre est déduite des données de [**Sawbridge et Sykes 1971 ; Nadeau 1969**]. Il est difficile d'expliquer cette différence. Néanmoins, il apparait que les données de [**Lefebvre 1977 ; Alamo et al. 1978**] proviennent de glissement double. Ceci pourrait expliquer le fait d'observer des contraintes résolues de cisaillement critique bien inférieures à celles de [**Nadeau 1969 ; Sawbridge et Sykes 1971**] (ou ne se plaçant pas dans la tendance de ces dernières). De ce fait, afin de respecter l'hypothèse ($\mathcal{H}_0$) de Eq. III.4, les données de [**Lefebvre 1977 ; Alamo et al. 1978**] sont écartées.

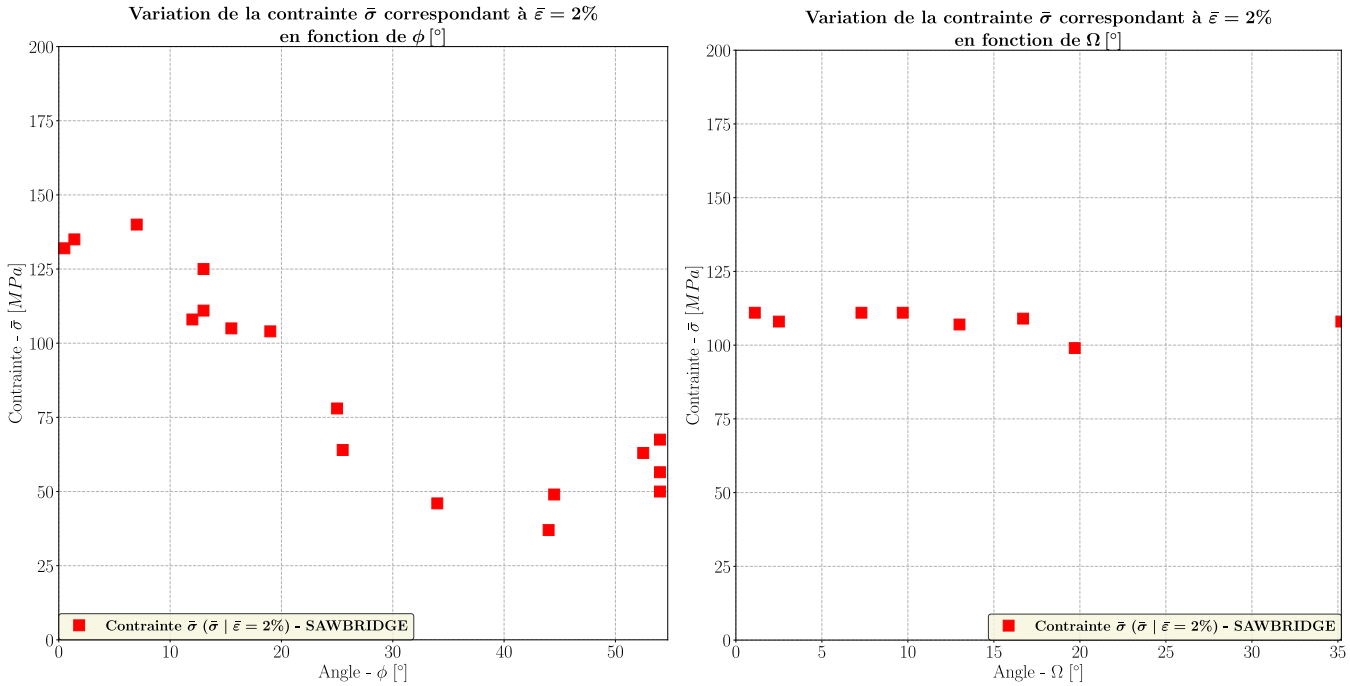
Finalement les données expérimentales concernant la famille {110} sur lesquelles sont calibrés les différents paramètres des deux lois sont regroupées Fig. III.6-(b) (données en rouge).

III.2.3 Données de [Sawbridge et Sykes 1971]

Les résultats numériques sont comparés avec les résultats expérimentaux obtenus par [**Sawbridge et Sykes 1971**]. Cette étude est retenue car les expérimentateurs sollicitent le monocristal sur un nombre conséquent d'orientations. Le point regrettable est qu'ils n'effectuent cette étude qu'à une seule température et à une seule vitesse de déformation à savoir $T = 1600.0\,[K]$ et $\dot{\bar{\varepsilon}} = 10^{-4}\,[s]^{-1}$. Les deux orientations balayées par l'axe de compression sont définies Fig. III.2. Cette variation de

l'orientation de l'axe de compression est prise en compte numériquement par une rotation du réseau cristallin correspondant à l'orientation de l'axe de compression considéré.

[Sawbridge et Sykes 1971] fournissent les contraintes résolues de cisaillement critique des 3 familles, à savoir $\{\tau^{CRSS}_{\{100\}}, \tau^{CRSS}_{\{110\}}, \tau^{CRSS}_{\{111\}}\}$, à la température et vitesse de déformation des essais expérimentaux. Au-delà de fournir ces contraintes, les auteurs explicitent les contraintes d'écoulement $\bar{\sigma}$ ($\bar{\sigma} \mid \bar{\varepsilon} = 2\%$) obtenues suivant l'orientation de l'axe de compression, ainsi que certaines des courbes contraintes-déformations.



(a) $\bar{\sigma}$ ($\bar{\sigma} \mid \bar{\varepsilon} = 2\%$) en fonction de l'angle ϕ.

(b) $\bar{\sigma}$ ($\bar{\sigma} \mid \bar{\varepsilon} = 2\%$) en fonction de l'angle Ω.

FIGURE III.7 – Contraintes d'écoulement prise à $\bar{\varepsilon} = 2\%$ lorsque l'axe de compression balaie les deux orientations (ϕ, Ω). **[Sawbridge et Sykes 1971]**

L'échantillon utilisé dans l'étude de **[Sawbridge et Sykes 1971]** ainsi que ses dimensions sont regroupés Fig. III.1. Afin de simplifier la modélisation numérique et en particulier l'étape de maillage, un parallélépipède rectangle, avec le raffinement de maillage décrit dans la partie III.1.4, est utilisé dans les simulations numériques.

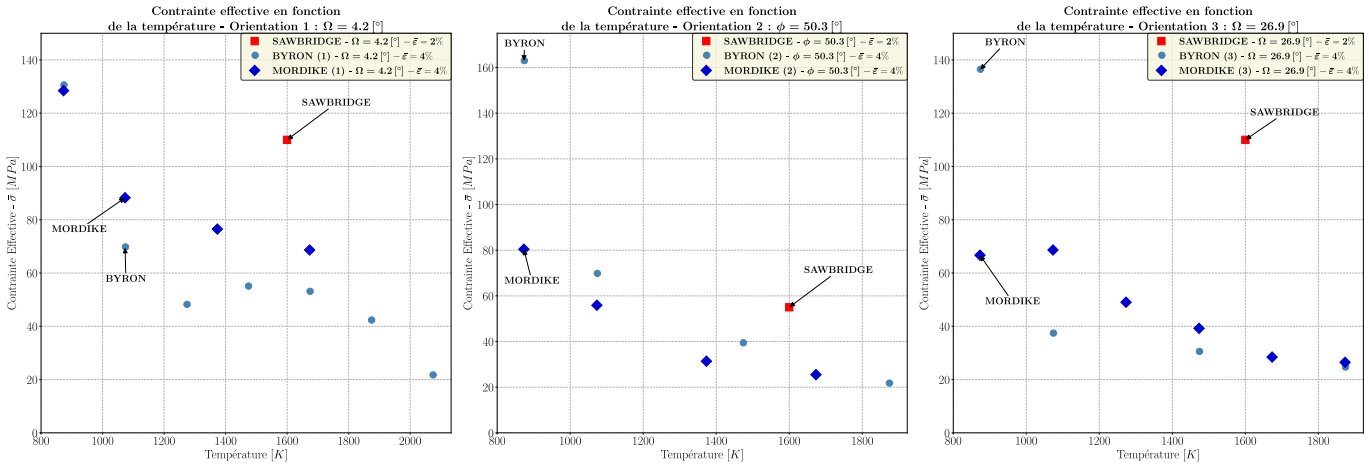
Les résultats issus des simulations numériques utilisant les lois monocristallines, lois présentées précédemment dans le document (lois CosH et DD), sont comparées aux résultats expérimentaux. La comparaison est estimée bonne lorsque les contraintes d'écoulement prises à $\bar{\varepsilon} = 2\%$ sont en bon accord avec les données de **[Sawbridge et Sykes 1971]** (Fig. III.7) à la fois sur l'orientation ϕ et à la fois sur l'orientation Ω.

III.2.4 Données de [Byron 1968a ; Mordike 1976]

Les résultats numériques sont comparés avec les résultats expérimentaux obtenus par **[Byron 1968a ; Mordike 1976]**. Ces études sont retenues car d'une part les expérimentateurs effectuent les mêmes essais expérimentaux (même axe de compression, même vitesse de déformation, même batch de fabrication, quasiment les mêmes températures). D'autre part les expérimentateurs balaient une large gamme de températures au détriment de balayer une large gamme d'axes de compression.

Le fait de balayer une large gamme de températures est très intéressant vis-à-vis de l'accident étudié (RIA).

[Byron 1968a ; Mordike 1976] fournissent l'ensemble des courbes contraintes en fonction des déformations obtenues suivant la température et l'orientation de l'axe de compression.



(a) Orientation 1 - $\Omega = 4.2\,[°]$. (b) Orientation 2 - $\phi = 50.3\,[°]$. (c) Orientation 3 - $\Omega = 26.9\,[°]$.

FIGURE III.8 – Contrainte effective ($\bar{\sigma}$) en fonction de la température.
Comparaison BYRON-MORDIKE ($\bar{\sigma}|\bar{\varepsilon} = 4\%$) et SAWBRIDGE ($\bar{\sigma}|\bar{\varepsilon} = 2\%$).

La figure Fig. III.8 présente la comparaison des contraintes effectives obtenues par **[Byron 1968a ; Mordike 1976]** et **[Sawbridge et Sykes 1971]**.

D'une part les contraintes d'écoulement de **[Byron 1968a ; Mordike 1976]** sont prises pour une déformation de l'ordre de $\bar{\varepsilon} \sim 4\,[\%]$. En effet pour une déformation plus basse, il a été jugé que la contrainte effective ne correspondait pas à la contrainte d'écoulement.

D'autre part, pour **[Sawbridge et Sykes 1971]**, une contrainte effective mesurée pour une déformation de l'ordre de $\bar{\varepsilon} \sim 2\,[\%]$ correspond bien à la contrainte d'écoulement.

Mise à part cette différence il est à remarquer que les données de **[Byron 1968a ; Mordike 1976]** sont en bonne adéquation sur les 3 orientations étudiées hormis dans le domaine des « basses » températures. Cette différence peut trouver son explication dans la motivation de **[Mordike 1976]** à conduire la même campagne expérimentale que **[Byron 1968a]**, c'est-à-dire pour étudier le manque a priori de contrôle de la stoechiométrie au sein des essais de **[Byron 1968a]**. Cet effet, comme mentionné directement par **[Mordike 1976]**, serait important dans le domaine des basses températures. Celui-ci diminuerait à mesure que la température augmente.

Il est à remarquer que les résultats de **[Sawbridge et Sykes 1971]** ne correspondent que sur l'orientation 2 de **[Byron 1968a ; Mordike 1976]** à savoir $\phi = 50.3\,[°]$. Pour rappel c'est cette orientation qui permet de calculer la contrainte résolue de cisaillement critique de la famille {100}. De ce fait les résultats concernant cette contrainte résolue de cisaillement critique pour cette famille sont en bon accord entre les 3 expérimentateurs.

Concernant les deux autres orientations, à savoir l'orientation 1 et 3 (Fig. Fig. III.8-(a)-(c)), les écarts relatifs de contraintes d'écoulement obtenues sont importants. En effet, l'écart est de l'ordre de $\Delta\bar{\sigma} \sim 50\,[MPa]$. Pour l'orientation 3, il pourrait y avoir une explication dans le fait que **[Byron 1968a ; Mordike 1976]** ne précisent pas la direction de l'axe de compression, l'angle a donc été approximé via la figure de pôle inverse donnée par les auteurs. Il se pourrait que l'axe de compression de **[Byron 1968a ; Mordike 1976]** ne soit pas orienté sur l'angle décrit par Ω, c'est-à-dire de $[011] \longrightarrow \Omega = 16.0\,[°]$, mais plutôt sur un angle Ω_{bis} définit de $[011] \longrightarrow \phi = 25.0[°]$. Ceci favoriserait l'activation de la famille {100} et expliquerait les faibles valeurs obtenues par **[Byron 1968a]** et **[Mordike 1976]**. Concernant l'orientation 1, l'écart est clair et ne peut pas être expliqué.

En résumé, les trois auteurs s'accordent sur la variation et la valeur de la contrainte résolue de cisaillement critique de la famille {100}. Néanmoins, les auteurs présentent des écarts importants sur la contrainte d'écoulement, avec **[Byron 1968a ; Mordike 1976]** d'un côté et **[Sawbridge et Sykes 1971]** de l'autre. Cet écart, de l'ordre de $\Delta\bar{\sigma} \sim 50\,[MPa]$, est loin d'être négligeable. De ce fait, et en particulier du fait de l'écart important observé sur les deux orientations (Orientation

1-3 de [**Byron 1968a ; Mordike 1976**]), il est attendu un écart important lorsque les résultats issus des simulations numériques sont comparés avec les données expérimentales de [**Byron 1968a ; Mordike 1976**] et [**Sawbridge et Sykes 1971**].

L'échantillon utilisé dans les études de [**Byron 1968a ; Mordike 1976**] ainsi que ses dimensions sont regroupés Fig. III.1. Un parallélépipède rectangle, avec le raffinement de maillage décrit dans la partie III.1.4, est utilisé dans les simulations numériques.

Les résultats issus des simulations numériques utilisant les lois monocristallines, lois présentées précédemment dans le document (lois CosH et DD), sont comparées aux résultats expérimentaux. La comparaison est estimée bonne lorsque les contraintes d'écoulement prises à $\bar{\varepsilon} = 2\%$ sont en bon accord avec les données de [**Byron 1968a ; Mordike 1976**] (Fig. III.8-(a)-(b)) à la fois sur l'orientation 1 et 2. Du fait d'un doute important sur l'orientation 3, les données sur cette orientation sont écartées de la comparaison.

III.3 Cadre et calibration d'un cas d'étude : Cas-3

Pour rappel, deux hypothèses de travail permettent de déduire la contrainte résolue de cisaillement critique en fonction de la température. Ces dernières sont explicitées Eq. III.4.

Ces deux hypothèses sont définies ci-dessous :

$$\begin{array}{rl} (\mathcal{H}_0) & \text{La déformation plastique est entièrement supportée par un système de glissement : } \dot{\varepsilon}_{\mathsf{vp}} = f_s\,\dot{\gamma}_s. \\ \text{Avec :} & f_s \quad \text{Facteur de Schmid du système } s \\ (\mathcal{H}_1) & \text{L'instant de déformation considérée correspond à un régime plastique parfait : } \dot{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{0}. \\ \text{Avec :} & \dot{\boldsymbol{\sigma}} = \boldsymbol{L} : (\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathsf{t}} - \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathsf{vp}}) \end{array} \tag{III.4}$$

En considérant le problème d'intérêt rappelé Eq. III.1 et un chargement unidirectionnel, les deux hypothèses faites Eq. III.4 permettent d'inverser les relations Eq. III.2 d'une part pour la loi avec le formalisme en Cosinus Hyperbolique (loi CosH), et Eq. III.3 d'autre part pour la loi avec le formalisme en Double Décrochement (loi DD). Cette inversion, dans chacun des cas, permet d'exprimer la contrainte du système considéré (τ_s) en fonction de l'ensemble des paramètres permettant de définir la loi visco-plastique. Cette inversion est explicitée Eq. III.5 (formalisme CosH) et Eq. III.6 (formalisme DD).

Formalisme en *Cosinus Hyperbolique* voir Eq. III.2

$$\tau_s = \tau_i^0 \times arccosh\left[1 + \frac{\dot{\bar{\varepsilon}}_{\mathsf{t}}}{f_s \rho_s^{\mathsf{m}} \nu_D b^2 \times exp\left(-\frac{\Delta H_i^0}{k_{\mathsf{b}} T}\right)}\right]$$

$$\text{Avec :} \quad \tau_s > 0 \qquad \frac{\dot{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}}{f_s} = \dot{\gamma}_s \quad \text{D'après } (\mathcal{H}_0) \qquad \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathsf{t}} = \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathsf{vp}} \quad \text{D'après } (\mathcal{H}_1) \tag{III.5}$$

Formalisme en *Double Décrochement* voir Eq. III.3

$$\tau_s = \tau_i^P \left(1.0 - \left[-\frac{k_b T}{\Delta H_i^0}\, ln\left(\frac{\dot{\varepsilon}_t}{f_s \rho_s^m \nu_D b^2}\right)\right]^{\frac{1}{q}}\right)^{\frac{1}{p}}$$

$$\text{Avec :} \quad \left| \begin{array}{ll} \tau_s > 0 & \\ \dfrac{\dot{\varepsilon}_{vp}}{f_s} = \dot{\gamma}_s & \text{D'après } (\mathcal{H}_0) \\ \dot{\varepsilon}_t = \dot{\varepsilon}_{vp} & \text{D'après } (\mathcal{H}_1) \end{array} \right. \tag{III.6}$$

Une fois dans le régime de plasticité cristalline, l'hypothèse $(\mathcal{H}_1)$ Eq. III.4 garantit que la contrainte obtenue, à savoir la contrainte d'écoulement, est la contrainte d'entrée en plasticité de la famille considérée ($(\mathcal{H}_0)$ Eq. III.4). Cette contrainte d'écoulement est la contrainte résolue de cisaillement critique du système en question et par extension de la famille en question. Il est à rappeler que la contrainte résolue de cisaillement critique est définie par famille. Pour le dire plus simplement, les deux hypothèses $(\mathcal{H}_0)$ et $(\mathcal{H}_1)$ (cf. Eq. III.4) permettent d'obtenir la contrainte résolue du système considéré (τ_s) correspondant alors à la contrainte résolue de cisaillement critique (ou contrainte d'entrée en visco-plasticité au facteur de Schmid près) de la famille considérée, à savoir la famille qui contient le système s considéré (cf. Eq. III.5 et Eq. III.6 pour les différents formalismes).

III.3.1 Cadre retenu pour la calibration par la méthode des moindres carrées des coefficients de la loi monocristalline

La méthode des moindres carrées est largement utilisée dans la suite afin de déterminer numériquement les différents coefficients de chacune des familles. En particulier la méthode développée par **[Levenberg 1944 ; Marquardt 1963]** a été largement utilisée. Cette dernière donne au mieux un minimum global. Néanmoins c'est rarement le cas et celle-ci donne généralement un minimum local qui dépend fortement de l'état initial. Enfin, la méthode est spécifique à chacune des lois et des paramètres qui peuvent varier.

Il est à rappeler qu'à ce stade la loi d'évolution ou la loi monocristalline (cf. Eq. III.2 pour la loi CosH et Eq. III.3 pour la loi DD) n'est que posée théoriquement. Il reste à déterminer numériquement les différents coefficients la constituant ($\{\tau_i^0, \Delta H_i^0, \rho_s^m\}_{i\in\{\{100\},\{110\}\}}$ pour la loi CosH et $\{p_i, q_i\}_{i\in\{\{100\},\{110\}\}}$ pour la loi DD) afin d'être dans la capacité d'effectuer des simulations numériques.

Pour ce qui est du formalisme en Cosinus Hyperbolique (loi CosH), bien que l'algorithme porte sur la variation de ces trois paramètres ($\{\tau_i^0, \Delta H_i^0, \rho_s^m\}_{i\in\{\{100\},\{110\}\}}$), la densité de dislocations mobiles spécifique à une famille (ρ_i^m) est fixe et ne varie pas à la suite d'une réduction des moindres carrées. La densité de dislocation mobile est fixée à : $\forall i \,|\, i \in \{\{100\},\{110\}\}$, $\rho_i^m = 10^{12}\,[m]^{-2}$.

$$\left\| \begin{array}{l} \tau_{\{100\}}^0 = LM^* \\ \Delta H_{\{100\}}^0 = LM \\ \rho_{\{100\}}^m = 10^{12} \end{array} \right\| \quad \left\| \begin{array}{ll} \tau_{\{110\}}^0 = LM & [MPa] \\ \Delta H_{\{110\}}^0 = LM & [eV] \\ \rho_{\{110\}}^m = 10^{12} & [m]^{-2} \end{array} \right. \tag{III.7}$$

Pour ce qui est du formalisme en Double Décrochement (loi DD) Eq. III.6, bien que l'algorithme porte sur la variation de ces deux paramètres ($\{p_i, q_i\}_{i\in\{\{100\},\{110\}\}}$), l'exposant q_i spécifique à chacune

∗. *LM* pour **[Levenberg 1944]** **[Marquardt 1963]**. La valeur est indéterminée et dépendra des données injectées dans l'algorithme des moindres carrées.

des familles, est fixe et ne varie pas à la suite d'une réduction des moindres carrées. Ce paramètre est fixé à la valeur : $\forall i \,|\, i \in \{\{100\},\{110\}\}$, $q_i = 35.0\,[-]$. Certains des paramètres sont fixés et leurs valeurs numériques sont explicitées ci-dessous Eq. III.8.

$$\left\| \begin{array}{l} \tau^{Peierls}_{\{100\}} = 5 \times 10^3 \\ \Delta H^0_{\{100\}} = 5.5 \\ \rho^{\mathsf{m}}_{\{100\}} = 10^{12} \\ p_{\{100\}} = LM \\ q_{\{100\}} = 35.0 \end{array} \right\| \left\| \begin{array}{ll} \tau^{Peierls}_{\{110\}} = 15 \times 10^3 & [MPa] \\ \Delta H^0_{\{110\}} = 5.5 & [eV] \\ \rho^{\mathsf{m}}_{\{110\}} = 10^{12} & [m]^{-2} \\ p_{\{110\}} = LM & [-] \\ q_{\{110\}} = 35.0 & [-] \end{array} \right. \tag{III.8}$$

Les autres paramètres (cf. Eq. III.5 loi en CosH et Eq. III.6 loi en DD) sont fixés et donnés par les conditions de simulation ou l'orientation de l'axe de compression considérée.

La valeur du paramètre q pour la loi Double Décrochement Eq. III.8 est très élevée par rapport aux recommandations Eq. III.3. Les bornes sont tirées directement de [**Portelette 2018**]. Il n'a pas été possible (pour ma part) d'avoir accès à la littérature mentionnant les bornes de ce paramètre à savoir [**Kocks et al. 1975**] et [**Frost et Ashby 1982**], articles mentionnés dans les travaux de [**Portelette 2018**]. Il est donc difficile de savoir si les bornes sont issues de contraintes mathématiques auquel cas il faudra modifier ce paramètre ou si ces bornes sont juste données en recommandation.

Le cas d'étude, nommé [**Cas-3**], est présenté ici. Il est à mentionner que deux autres cas ont été étudiés (cf. Annexe E pour plus de détails à ce sujet).

Le cas d'étude retenu, à savoir le [**Cas-3**], se base uniquement sur les données expérimentales. Les données des contraintes résolues de cisaillement critique (CRSS), en fonction de la température, sont exploitées afin de déduire numériquement les coefficients intervenant dans la loi monocristalline. Les coefficients sont définies par famille de glissement. Pour ce faire une méthode de minimisation d'une certaine erreur (cf. [**Levenberg 1944 ; Marquardt 1963**]) est utilisée sur les données des deux familles à savoir la famille {100} (cf. Fig. III.5-(c) données en rouge) et la famille {110} (cf. Fig. III.6-(b) données en rouge). La famille {111} est écartée faute de données expérimentales sur cette dernière. En d'autres termes, il n'est pas possible d'expliciter numériquement les coefficients constituant la loi dévolution pour cette famille ({111}) en se basant uniquement sur les données expérimentales fournies (CRSS en fonction de la température). Celle-ci n'est donc pas considérée dans la suite pour ce cas d'étude [**Cas-3**].

En particulier l'expression des CRSS en fonction de la température est utilisée (cf. Eq. III.5 pour la loi CosH et Eq. III.6 pour la loi DD).

III.3.2 Application au cas d'étude : Cas-3

Les paramètres d'identification des deux familles sont explicités Eq. III.9 pour le formalisme en Cosinus Hyperbolique et Eq. III.10 pour le mécanisme en Double Décrochement. La variation des contraintes résolues de cisaillement critique de ces deux familles en fonction de la température est explicitée Fig. III.9. Il est à remarquer que les deux formalismes sont équivalents dans le domaine de températures étudié. Les deux lois présentent des différences seulement dans le domaine des basses températures, domaine où la pastille de dioxyde d'uranium n'exhibe pas de déformation visco plastique exception faite de la « visco plasticité » induite par l'irradiation.

$$\left\| \begin{array}{l} \tau^0_{\{100\}} = 1.179 \\ \Delta H^0_{\{100\}} = 4.989 \\ \rho^{\mathsf{m}}_{\{100\}} = 10^{12} \end{array} \right\| \left\| \begin{array}{ll} \tau^0_{\{110\}} = 4.750 & [MPa] \\ \Delta H^0_{\{110\}} = 5.246 & [eV] \\ \rho^{\mathsf{m}}_{\{110\}} = 10^{12} & [m]^{-2} \end{array} \right. \tag{III.9}$$

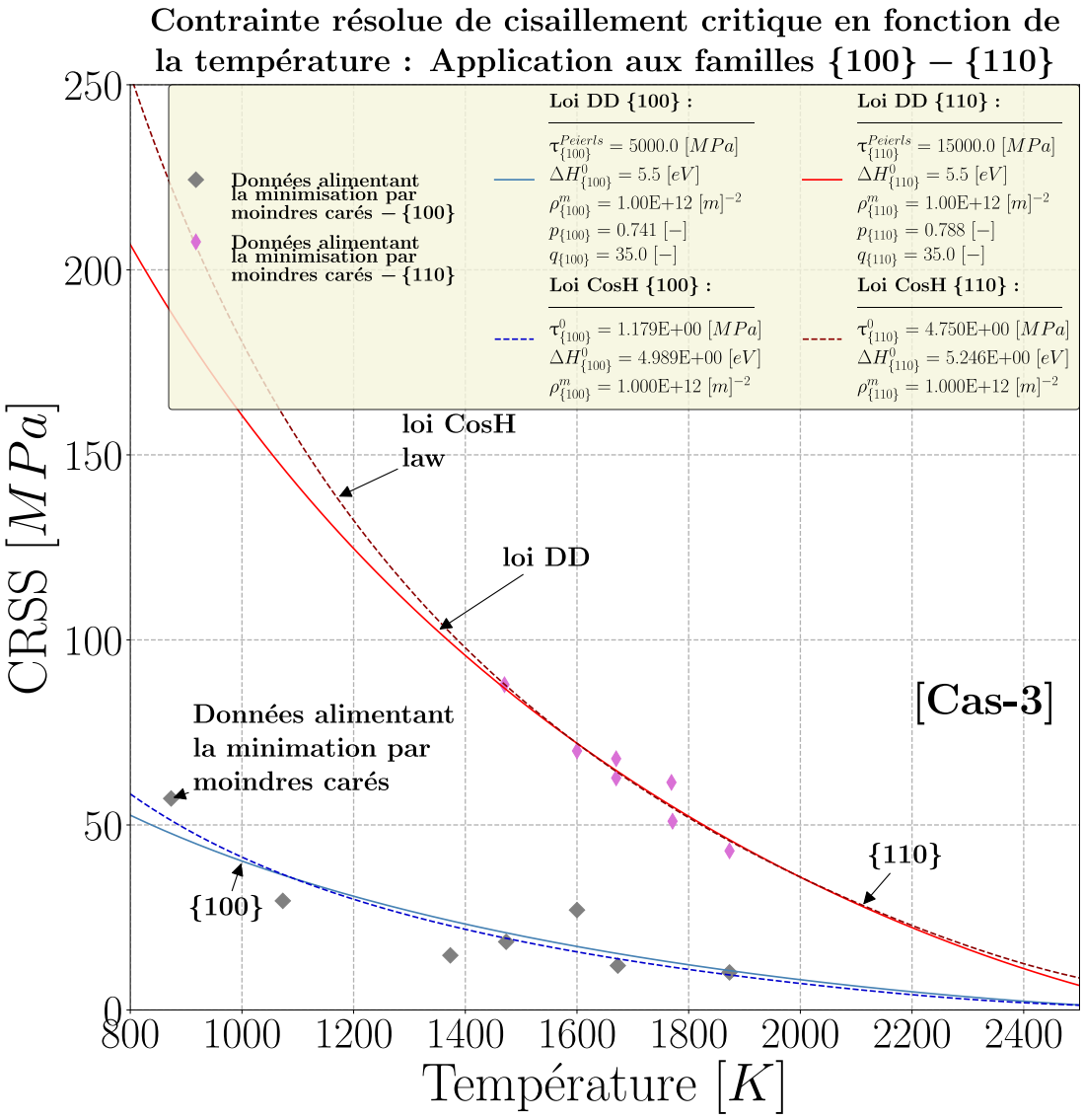


FIGURE III.9 – **[Cas-3]** - Contraintes résolues de cisaillement critique (CRSS) en fonction de la température pour les deux familles et les deux lois.

$$
\left\|\begin{array}{ll}
\tau^{Peierls}_{\{100\}} = 5\times10^{3} & \\
\Delta H^{0}_{\{100\}} = 5.5 & \\
\rho^{m}_{\{100\}} = 10^{12} & \\
p_{\{100\}} = 0.741 & \\
q_{\{100\}} = 35.0 &
\end{array}\right\|
\left\|\begin{array}{ll}
\tau^{Peierls}_{\{110\}} = 15\times10^{3} & [MPa] \\
\Delta H^{0}_{\{110\}} = 5.5 & [eV] \\
\rho^{m}_{\{110\}} = 10^{12} & [m]^{-2} \\
p_{\{110\}} = 0.788 & [-] \\
q_{\{110\}} = 35.0 & [-]
\end{array}\right. \tag{III.10}
$$

III.4 Résultats de la calibration des lois monocristallines [Cas-3] vis-à-vis des essais expérimentaux de [Byron 1968a], [Mordike 1976] et [Sawbridge et Sykes 1971]

La comparaison se fait entre les simulations numériques et les résultats expérimentaux des différents auteurs à savoir **[Byron 1968a ; Mordike 1976]** et **[Sawbridge et Sykes 1971]**. En particulier la contrainte effective $\bar{\sigma}|\bar{\varepsilon} = 2\,[\%]$ obtenue numériquement est comparée à la contrainte

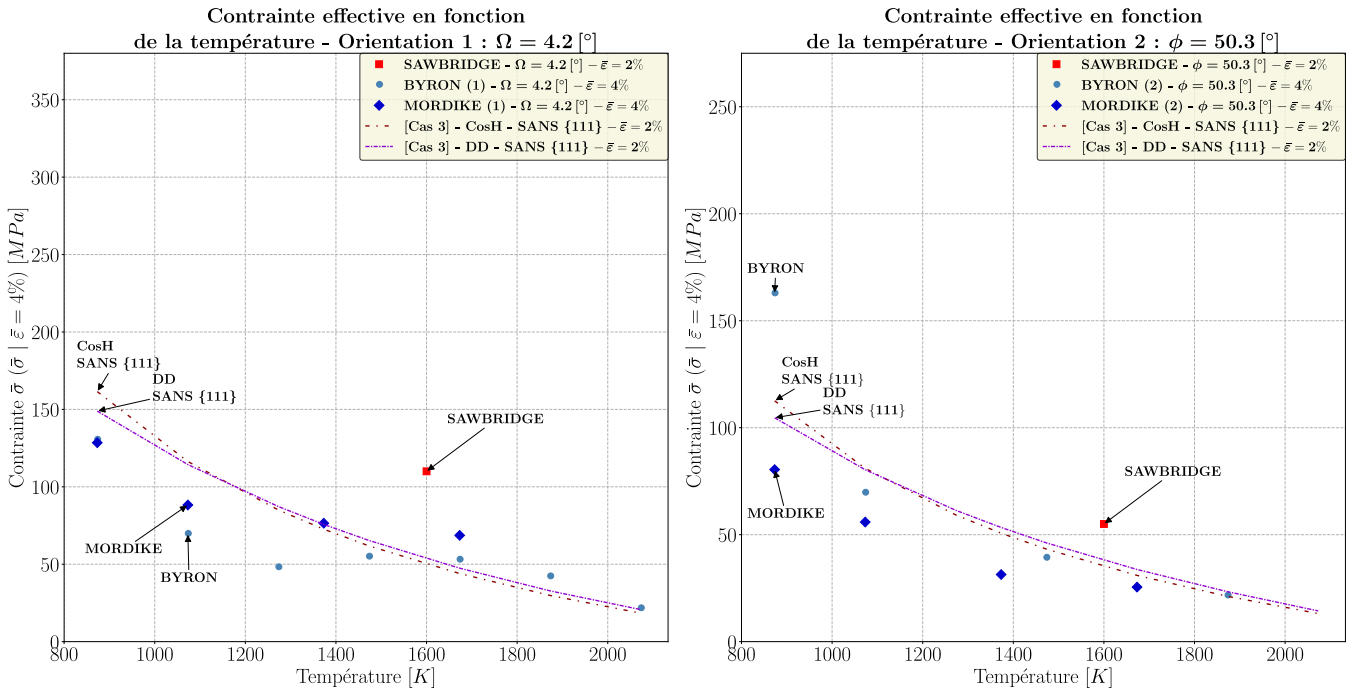
effective expérimentale à savoir $\bar{\sigma}|\bar{\varepsilon} \sim 2\,[\%]$ pour **[Sawbridge et Sykes 1971]** et $\bar{\sigma}|\bar{\varepsilon} \sim 4\,[\%]$ pour **[Byron 1968a ; Mordike 1976]**. Les auteurs se trouvent dans le régime viscoplastique établi pour la déformation considérée.

Il est à souligner que la calibration des coefficients par la méthode de minimisation des moindres carrés, présentée précédemment, a été est faite sur certaines données expérimentales de ces trois auteurs ([**Byron 1968a ; Mordike 1976**] et [**Sawbridge et Sykes 1971**]). Ceci introduit donc un biais dans les comparaisons présentées dans les parties III.4.1 et III.4.2. Néanmoins il n'a pas été possible, à ce jour, d'obtenir d'autres données exploitables dans la littérature, données autres que celles de [**Byron 1968a**], [**Mordike 1976**] et [**Sawbridge et Sykes 1971**].

Dans un premier temps la comparaison est faite avec les résultats expérimentaux de [**Byron 1968a**] et [**Mordike 1976**].

Dans un deuxième temps la comparaison est faite avec les résultats expérimentaux de [**Sawbridge et Sykes 1971**].

III.4.1 [Cas-3] vis-à-vis des essais expérimentaux de [Byron 1968a ; Mordike 1976]



(a) Orientation 1 - $\Omega = 4.2\,[°]$.

(b) Orientation 1 - $\phi = 50.3\,[°]$.

FIGURE III.10 – Évolution de la contrainte effective ($\bar{\sigma}$) en fonction de la température : Comparaison **[Cas-3]** *vs* **[Byron 1968a ; Mordike 1976]**.

La comparaison des contraintes effectives, obtenues d'un côté numériquement [Cas-3] et d'un autre expérimentalement **[Byron 1968a ; Mordike 1976]**, en fonction de la température (à vitesse de déformation macroscopique fixée et pour deux orientations) est regroupée Fig. III.10.

Les résultats issus des simulations numériques ([**Cas-3**]) s'inscrivent bien dans la variation des contraintes effectives, variation fonction de la température, obtenue expérimentalement par [**Byron 1968a**] et [**Mordike 1976**].

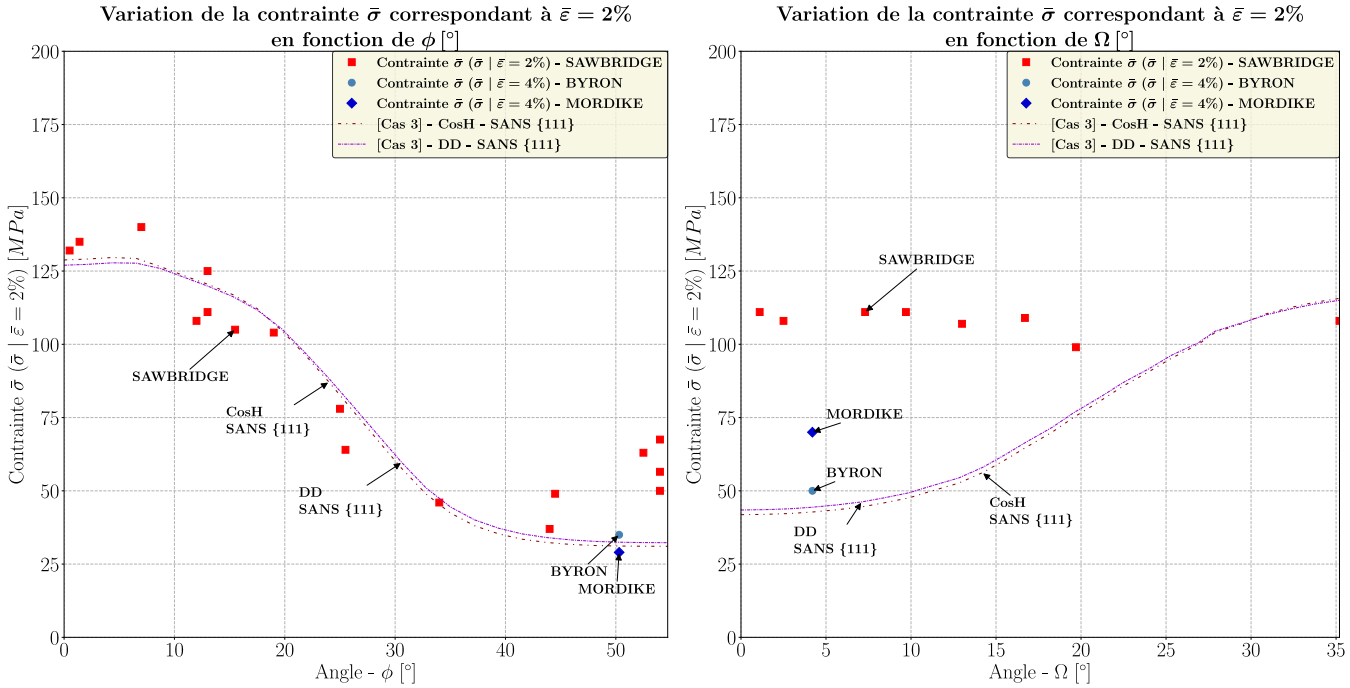
III.4.2 [Cas-3] vis-à-vis des essais expérimentaux de [Sawbridge et Sykes 1971]

La comparaison des contraintes effectives, obtenues d'un côté numériquement [Cas-3] et d'un autre expérimentalement [**Sawbridge et Sykes 1971**], en fonction de l'axe de compression (à température et vitesse de déformation macroscopique fixées) est regroupée Fig. III.11.

Les résultats issus des simulations numériques ([**Cas-3**]) s'inscrivent bien dans la variation des contraintes effectives pour l'une des deux orientations retenues par les auteurs [**Sawbridge et Sykes 1971**], à savoir la variation obtenue lorsque l'axe de compression balaie l'orientation ϕ.

Il est à noter que les résultats numériques sont très mauvais vis-à-vis des résultats expérimentaux obtenus par [**Sawbridge et Sykes 1971**] lorsque l'axe de compression est orienté selon l'angle Ω (cf. Fig. III.11-(b)). Il est bon de souligner la différence entre les résultats expérimentaux de [**Sawbridge et Sykes 1971**] d'un côté et [**Byron 1968a ; Mordike 1976**] d'un autre côte. Cette orientation est très problématique car il ne m'est pas paru possible, à ce jour, de pouvoir expliquer cette différence.

La simulation numérique ne peut pas satisfaire l'ensemble des auteurs.



(a) $\bar{\sigma}$ ($\bar{\sigma} \mid \bar{\varepsilon} = 2\%$) en fonction de l'angle ϕ.

(b) $\bar{\sigma}$ ($\bar{\sigma} \mid \bar{\varepsilon} = 2\%$) en fonction de l'angle Ω.

FIGURE III.11 – Évolution de la contrainte effective ($\bar{\sigma}$ ($\bar{\sigma}|\bar{\varepsilon} = 2\,[\%]$)) en fonction de l'axe de sollicitation : Comparaison [**Cas-3**] *vs* [**Sawbridge et Sykes 1971**].

Les figures Fig. III.10 et Fig. III.11 regroupent l'ensemble des résultats numériques ([Cas-3]) et expérimentaux ([**Byron 1968a ; Mordike 1976**] et [**Sawbridge et Sykes 1971**]). Il apparait que le [Cas-3], bien que simpliste car celui-ci exclut une famille de glissement (la famille {111}), est relativement en bon accord avec les résultats issus des essais expérimentaux (comparaison des contraintes effectives dans le régime visco-plastique établi).

III.5 Synthèse du chapitre III

Les résultats expérimentaux de certains auteurs sembleraient s'exclure sur certaines orientations de l'axe de compression*. C'est notamment le cas de [**Byron 1968a ; Mordike 1976**] et [**Sawbridge et Sykes 1971**]. Pour les premiers auteurs, la déformation viscoplastique semblerait principalement induite par la famille qui présente une contrainte effective $\bar{\sigma}_{\mathsf{i}}$† (avec $\mathsf{i} \in \{\{100\},\{110\},\{111\}\}$) la plus basse. Pour les seconds auteurs, la déformation viscoplastique semblerait principalement induite par la famille qui présente un facteur de Schmid le plus élevé‡([**Sawbridge et Sykes 1971**]). Ces deux approches s'excluent sur certaines orientations de l'axe de compression. Il pourrait être envisagé que la déformation viscoplastique soit induite par un ou plusieurs autres mécanismes en plus de celui retenu (le mécanisme retenu est le franchissement de la barrière de Peierls [**Peierls 1940**] par double décrochement [**Seeger 1956**]). Ceci pourrait expliquer les résultats expérimentaux de [**Sawbridge et Sykes 1971**] mais exclurait ceux de [**Byron 1968a ; Mordike 1976**].

Trois cas différents ont été étudiés. Les deux premiers cas [**Cas-1**] et [**Cas-2**] se basent sur une calibration inverse via les résultats expérimentaux sur les contraintes effectives (cf. Annexe E). Le troisième cas étudié et détaillé précédemment dans le corps de ce chapitre est le [**Cas-3**]. Dans ce cas d'étude, seules les deux familles connues à savoir la famille {100} et la famille {110} sont gardées. Seul le mécanisme de franchissement de la barrière de Peierls [**Peierls 1940**] est gardé. Les contraintes résolues de cisaillement critique de ces deux familles sont calibrées sur les données expérimentales issues des études de [**Byron 1968a ; Mordike 1976 ; Sawbridge et Sykes 1971**] pour la famille {100} et les études de [**Nadeau 1969 ; Sawbridge et Sykes 1971**] pour la famille {110}.

Les figures Fig. III.10 et Fig. III.11 regroupent l'ensemble des résultats numériques ([Cas-3]) et expérimentaux ([**Byron 1968a ; Mordike 1976**] et [**Sawbridge et Sykes 1971**]).

Les courbes numériques issues du [**Cas-3**] sont relativement en bon accord avec les données expérimentales de [**Byron 1968a ; Mordike 1976**] (cf. Fig. III.10). En particulier, pour ces deux orientations, la variation de la contrainte effective en fonction de la température est bien retrouvée. Il est important de capter la dépendance vis-à-vis de la température car l'accident d'insertion de réactivité balaie une gamme de températures relativement large.

Concernant l'étude de [**Sawbridge et Sykes 1971**] qui s'effectue à $T = 1600.0\,[K]$, encore une fois, et ce malgré l'écart évident lorsque l'axe de compression balaie l'orientation défini par l'angle Ω, le [**Cas-3**] apparaît être un cas pertinent. Les résultats numériques (cf. Fig. III.11) de ce dernier cas sont très bons lorsque l'axe de compression balaie l'orientation définie par l'angle ϕ. L'écart sur l'angle Ω provient du désaccord sur les approches entre [**Byron 1968a ; Mordike 1976**] d'un côté et [**Sawbridge et Sykes 1971**] d'un autre.

Le [**Cas-3**]¶ constitue un choix raisonnable. Il écarte une famille (la famille {111}), famille dont les auteurs ne fournissent pas la contrainte résolue en fonction de la température. Il permet également de retrouver (au moins sur deux orientations) la dépendance de la contrainte effective vis-à-vis de la température. Il se base sur les observations de [**Byron 1968a**] appuyées par [**Mordike 1976**], auteurs qui conduisent la même campagne d'essais. Ce cas permet de retrouver, au moins sur l'orientation définie par l'angle ϕ, les résultats expérimentaux de [**Sawbridge et Sykes 1971**].

∗. Dans l'état actuel des choses, les résultats s'excluent. Je préfère néanmoins laisser cette phrase au conditionnel du fait qu'il y ait relativement peu d'études expérimentales monocristallines sur le sujet et que ces dernières sont relativement anciennes.

†. $\bar{\sigma}_{\mathsf{s}} = \dfrac{\tau_{\mathsf{s}}^{CRSS}}{f_{\mathsf{s}}}$ avec s le système de glissement considéré et par extension la famille i regroupant ce système.

‡. Il est fait mention ici du maximum des facteurs de Schmid, facteur défini pour un système, de l'ensemble des systèmes de glissement constituant la famille en question.

¶. Les paramètres d'identification du [**Cas-3**] sont définis Eq. III.10 pour le formalisme en double décrochement et Eq. III.9 pour le formalisme en cosinus hyperbolique. La variation des contraintes résolues de cisaillement critique des deux familles est illustrée Fig. III.9.

Chapitre IV

Modélisation et validation (FFT vs Expérience) du comportement polycristallin de l'UO_2 en condition accidentelle RIA.

IV.1 Contexte expérimental et contexte de simulation

La validation des résultats à l'échelle polycristalline se fait par rapport aux essais expérimentaux de [**Salvo 2014**]. Les caractéristiques expérimentales de [**Salvo 2014**] sont détaillées. Il s'ensuit la présentation de la simulation numérique permettant de s'approcher des conditions expérimentales de l'auteur. Il est à noter qu'une étude de sensibilité au maillage, à l'échelle polycristalline, a été conduite et ce avant la validation des résultats. Pour ce qui est de l'étude de sensibilité au maillage, celle-ci n'est pas présentée dans le corps du document. Le lecteur est redirigé vers l'Annexe E pour plus de détails à ce sujet.

IV.1.1 Contexte expérimental de [Salvo 2014]

Les essais expérimentaux menés par [**Salvo 2014**] se font sur deux lots : le lot forte densité (HD : $\rho \sim 98.1 \pm 0.3\,[\%]$) et le lot faible densité dit de référence (REF FD : $\rho \sim 96.4 \pm 0.3\,[\%]$). L'éprouvette cylindrique utilisée (cf. Fig. IV.1) présente des dimensions (avec h hauteur de l'éprouvette et $\varnothing$ diamètre de l'éprouvette) variables suivant le lot étudié : pour le lot faible densité (REF FD) $h = 12\,[mm]$, $\varnothing = 8.2[mm]$; pour le lot forte densité (HD) $h = 15\,[mm]$, $\varnothing = 8.2[mm]$.

Il est à rappeler les caractéristiques des deux lots utilisés lors des essais expérimentaux de [**Salvo 2014**] ci-dessous :

- ♢ Vitesse de déformation variable avec $\dot{\bar{\varepsilon}}_{33} \in \{10^{-4}, 10^{-3}, 10^{-2}, 10^{-1}\}\ [s]^{-1}$.
- ♢ Densité et dimensions de l'échantillon spécifiques au lot étudié.
- ♢ Stoechiométrie $\chi \sim 2.00 \pm 0.001\,[-]$.
- ♢ Température variable $T \in \{1100, 1350, 1550, 1700\}\ [°C]$.
- ♢ Taille de grain variable et fonction de la densité de l'échantillon : lot faible densité (REF FD) $\varnothing_{Grain} \sim 10 \pm 0.9\,[\mu m]$ et lot forte densité (HD) $\varnothing_{Grain} \sim 14 \pm 1.1\,[\mu m]$, avec $\varnothing_{Grain}$ diamètre moyen des grains.
- ♢ Le lecteur est renvoyé aux équations Eq. II.4 et Eq. II.5 pour ce qui est de la répartition de la porosité (intra et inter-granulaire) respectivement au sein des lots faible et forte densités.

[**Salvo 2014**] effectue des essais de compression uniaxé (dans la direction de la hauteur de l'éprouvette) à vitesse de déformation imposée.

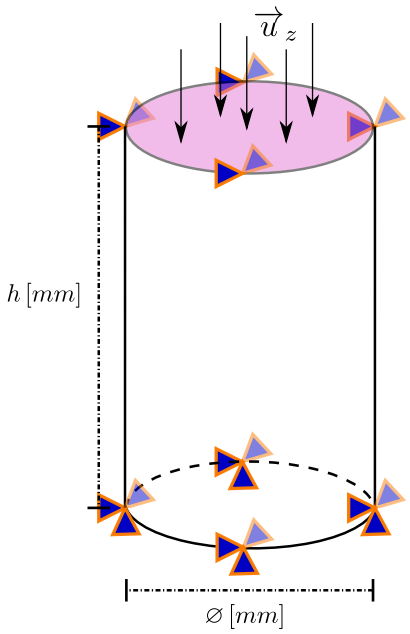


FIGURE IV.1 – Géométrie de l'échantillon utilisé dans l'étude de [**Salvo 2014**].

Pour ce qui est du chargement et des conditions aux limites, ces deux derniers sont illustrés Fig. IV.1.

♢ Les conditions de blocage sont les suivantes :

- ▶ Surface du bas : BLOCAGE du déplacement dans les trois directions - $U_X\,U_Y\,U_Z$.
- ▶ Surface du haut : BLOCAGE du déplacement dans deux directions - $U_X\,U_Y$.
- ▶ Le blocage dans les directions orthogonales à la sollicitation sont à imputer aux mors (directions X, Y).

♢ Les conditions de chargement sont les suivantes :

- ▶ Déplacement imposé à la surface du haut de l'échantillon (cf. Fig. IV.1 surface violette). Le déplacement U_Z est imposé tel que l'échantillon subit la vitesse de déformation macroscopique souhaitée.
- ▶ La température est maintenue constante lors de l'essai.

L'effet des mors (blocage des surfaces supérieure et inférieure dans les directions orthogonales à la sollicitation) induit une mise en tonneau de l'éprouvette. Il est à rappeler que dans la suite, les déformations vraies (fournies par [**Salvo 2014**]) et les contraintes « vraies » (moyennant une certaine hypothèse de calcul : voir Eq. II.6) sont utilisées.

IV.1.2 Contexte de simulation

La simulation numérique s'effectue sur FFT AMITEX [**Gelebart et Derouillat 2017**]. Pour ce qui est du contexte de résolution, les simulations numériques ont été effectuées sous l'hypothèse des petites perturbations (HPP). La géométrie de l'éprouvette (ou VER* pour Volume Élémentaire Représentatif) de simulation est quant à elle illustrée Fig. IV.2 (à gauche) avec la dimension de la cote a qui respecte $a << (h, \varnothing)$ (h hauteur de l'éprouvette expérimentale et $\varnothing$ diamètre de l'éprouvette expérimentale [**Salvo 2014**]). Les dimensions de ce VER (la cote a) dépend de la taille de grain retenue.

Le chargement imposé est une compression uniaxiale à vitesse de déformation imposée (cf. Fig. IV.2).

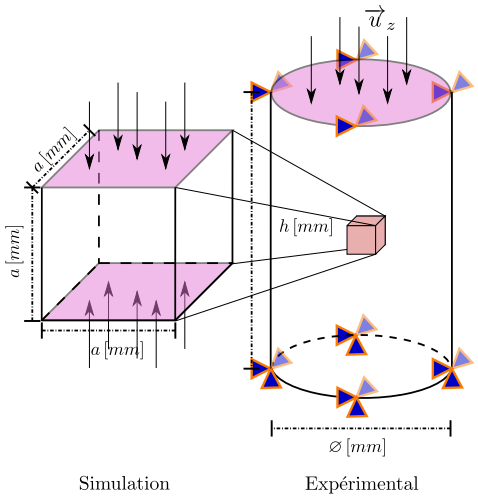


FIGURE IV.2 – Géométrie du VER utilisé lors des simulations : Volume extrait de la partie centrale des essais de **[Salvo 2014]** là où le chargement est jugé homogène.

♢ Les conditions de chargement sont les suivantes :

- ▶ Déformation imposée dans le sens de la sollicitation : $\bar{\varepsilon}_{33}$ imposée.
- ▶ La contrainte est nulle hors direction de sollicitation : $\bar{\sigma}_{ij} = 0$ avec $(i,j) \in \{1,2,3\}^2$ et $(i,j) \neq (3,3)$.
- ▶ La température est constante.
- ▶ Le temps final (T_F) est choisi de sorte d'avoir la vitesse de déformation souhaitée avec $\dot{\bar{\varepsilon}}_{33} = \dfrac{\bar{\varepsilon}_{33}}{T_F}$.
- ▶ Le nombre d'incréments (N_{Incr}) dans la simulation a été fixé à : $N_{Incr} = \bar{\varepsilon}_{33} \times 100 \times 1000$.

La récupération des données et les post-traitements se basent sur le fichier .std, fourni par AMITEX, qui regroupe l'évolution de l'ensemble des données macroscopiques ($\bar{\varepsilon}, \bar{\sigma}, t$ - déformation moyenne, contrainte moyenne et temps) au cours de la simulation : valeurs fournies pour chaque incrément de temps. Il est également possible de remonter aux champs locaux (contrainte, déformation, variables internes) à un temps donné en exploitant les fichiers .vtk. À ce stade, l'étude de la réponse effective suffit.

∗. Suite à l'étude menée sur la convergence à la taille du volume et au maillage (voir Annexe F), il est permis de qualifier le volume de VER.

Certaines caractéristiques des essais expérimentaux de [**Salvo 2014**] et des simulations numériques menées sous FFT AMITEX [**Gelebart et Derouillat 2017**] sont regroupées dans le tableau Tab. IV.1.

	SALVO 2014		SIMULATION FFT AMITEX
	Lot Forte Densité HD	Lot Faible Densité REF FD	HPP
Paramètres			
Dimension échantillon $[mm]$	Pastille cylindrique $h = 12.$ $\varnothing = 8.2$	Pastille cylindrique $h = 15.$ $\varnothing = 8.2$	VER cubique $a \sim 89.56 \times 10^{-3}$
Vitesse de déformation $\dot{\bar{\varepsilon}}\,[s]^{-1}$	$\{10^{-4}, 10^{-3}, 10^{-2}, 10^{-1}\}$		Choix utilisateur
Température $T\,[°C]$	$\{1100, 1350, 1550, 1700\}$		Choix utilisateur
Densité $\rho\,[\%]$	98.1 ± 0.3	96.4 ± 0.3	100
Stoechiométrie $\chi\,[-]$	2.00 ± 0.001		2.
Taille de Grain $\varnothing_{Grain}\,[\mu m]$	$14. \pm 1.1$	$10. \pm 0.9$	14.
Taille et Proportion de la Porosité $\varnothing_{Poro}\,[\mu m]$ - [%]	$\varnothing_{Poro} \sim 0.4\,[\mu m]$ $\sim 83\,[\%]$ Intra $\varnothing_{Poro} \sim 1.2\,[\mu m]$ $\sim 17[\%]$ Inter	$\varnothing_{Poro} \sim 0.4\,[\mu m]$ $\sim 87\,[\%]$ Intra $\varnothing_{Poro} \sim 2.1\,[\mu m]$ $\sim 13[\%]$ Inter	-
Caractéristiques des essais			
Type d'essai	Compression uniaxée $\dot{\bar{\varepsilon}}$ imposée		Compression uniaxée $\dot{\bar{\varepsilon}}$ imposée
Blocages	Surface Supérieure : U_X, U_Y Surface Inférieure : U_X, U_Y, U_Z		Conditions de périodicité
Chargement	Déplacement Surface Supérieure U_Z Correspondant à $\dot{\bar{\varepsilon}}_{33}$ souhaitée		$\bar{\varepsilon}_{33}$, T_F imposés Avec T_F temps final correspondant à $\dot{\bar{\varepsilon}}_{33}$ souhaitée.
Récupération	Déformation vraie $\bar{\varepsilon}_{33} = ln\left(1 + \frac{u_{33}}{h_0}\right)$ [%] Contrainte $\bar{\sigma}_{33} = \frac{F_{33}}{S_0}\,[MPa]$		Choix utilisateur

TABLEAU IV.1 – Tableau regroupant les différentes caractéristiques des essais expérimentaux de [**Salvo 2014**] ainsi que les caractéristiques des simulations effectuées avec FFT AMITEX [**Gelebart et Derouillat 2017**].

	SALVO 2014		BEN SAADA 2017	
	Lot Forte Densité HD	Lot Faible Densité REF FD	Lot 1	Lot 2
Paramètres				
Dimension échantillon $[mm]$	Pastille cylindrique $h = 12.$ $\varnothing = 8.2$	Pastille cylindrique $h = 15.$ $\varnothing = 8.2$	Pastille cylindrique $h = 16.3 \pm 0.13$ $\varnothing = 8.191 \pm 0.004$	Pastille cylindrique $h = 15.1 \pm 0.3$ $\varnothing = 8.356 \pm 0.002$
Vitesse de déformation $\dot{\bar{\varepsilon}}\,[s]^{-1}$	$\{10^{-4}, 10^{-3}, 10^{-2}, 10^{-1}\}$		$\{1, 5, 20, 70, 100\} \times 10^{-6}$	
Température $T\,[°C]$	$\{1100, 1350, 1550, 1700\}$		1500	
Densité $\rho\,[\%]$	98.1 ± 0.3	96.4 ± 0.3	98.1	98.1
Stoechiométrie $\chi\,[-]$	2.00 ± 0.001		-	
Taille de Grain $\varnothing_{Grain}\,[mm]$	$14. \pm 1.1$	$10. \pm 0.9$	$12. \pm 1.$	$15. \pm 1.$
Taille et Proportion de la Porosité $\varnothing_{Poro}\,[\mu m]$ - [%] F_p Fraction Surfacique Pores	$\varnothing_{Poro} \sim 0.4\,[\mu m]$ ~ 83 [%] Intra $\varnothing_{Poro} \sim 1.2\,[\mu m]$ ~ 17[%] Inter	$\varnothing_{Poro} \sim 0.4\,[\mu m]$ ~ 87 [%] Intra $\varnothing_{Poro} \sim 2.1\,[\mu m]$ ~ 13[%] Inter	$F_p \sim 2.5\,\%$ $\varnothing_{Poro} \sim 0.37\,[\mu m]$ ~ 72 [%] Intra $\varnothing_{Poro} \sim 0.88\,[\mu m]$ ~ 28[%] Inter	$F_p \sim 1.0\,\%$ $\varnothing_{Poro} \sim 0.35\,[\mu m]$ ~ 60 [%] Intra $\varnothing_{Poro} \sim 1.11\,[\mu m]$ ~ 40[%] Inter
Caractéristiques des essais				
Type d'essais	Compression uniaxée $\dot{\bar{\varepsilon}}$ imposée		Compression uniaxée $\dot{\bar{\varepsilon}}$ imposée	
Blocages	Surface Supérieure : U_X, U_Y Surface Inférieure : U_X, U_Y, U_Z		Surface Supérieure : U_X, U_Y Surface Inférieure : U_X, U_Y, U_Z	
Chargement	Déplacement Surface Supérieure U_Z Correspondant à $\dot{\bar{\varepsilon}}_{33}$ souhaitée		Déplacement Surface Supérieure U_Z Correspondant à $\dot{\bar{\varepsilon}}_{33}$ souhaitée	
Récupération	Déformation vraie $\bar{\varepsilon}_{33} = ln\left(1 + \frac{u_{33}}{h_0}\right)$ [%] Contrainte $\bar{\sigma}_{33} = \frac{F_{33}}{S_0}\,[MPa]$		Déformation $\bar{\varepsilon}_{33} = \frac{u_{33}}{h_0}$ [%] Contrainte $\bar{\sigma}_{33} = \frac{F_{33}}{S_0}\,[MPa]$	

TABLEAU IV.2 – Tableau regroupant les différentes caractéristiques des essais expérimentaux de [**Salvo 2014**] ainsi que de [**Ben Saada 2017**].

Les caractéristiques des essais de [**Salvo 2014**] sont mis en parallèle de ceux menés par [**Ben Saada 2017**] dans le tableau Tab. IV.2. Il y a relativement peu d'écart entre les différentes caractéristiques. Concernant les données fournies par [**Ben Saada 2017**], il est surprenant de constater une différence entre la fraction surfacique de porosité (F_p) et la densité. La première est une mesure locale sur un échantillon alors que la deuxième est globale, sur la pastille. À ce titre, [**Ben Saada 2017**] précise qu'il y a environ 2.5 fois plus de pores en intergranulaire dans le Lot 1 comparativement au Lot 2.

Il est à noter que les essais menés par [**Ben Saada 2017**] se font pour une gamme de vitesse de déformation relativement faible comparativement aux essais de [**Salvo 2014**]. À ce titre des comportements différents sont observés en fonction des conditions de sollicitations que sont la température et la vitesse de déformation macroscopique.

IV.2 Résultats et discussion de la calibration monocristalline appliquée aux polycristaux : [Cas-3] vis-à-vis des essais expérimentaux de [Salvo 2014]

Le [Cas-3], présenté et calibré dans le chapitre précédent traitant des monocristaux, est comparé, à l'échelle polycristalline, avec les résultats issus de la campagne expérimentale de [**Salvo 2014**]. De ce [Cas-3], seul le formalisme en Cosinus Hyperbolique (CosH) est étudié.

Quelques points sont à rappeler :

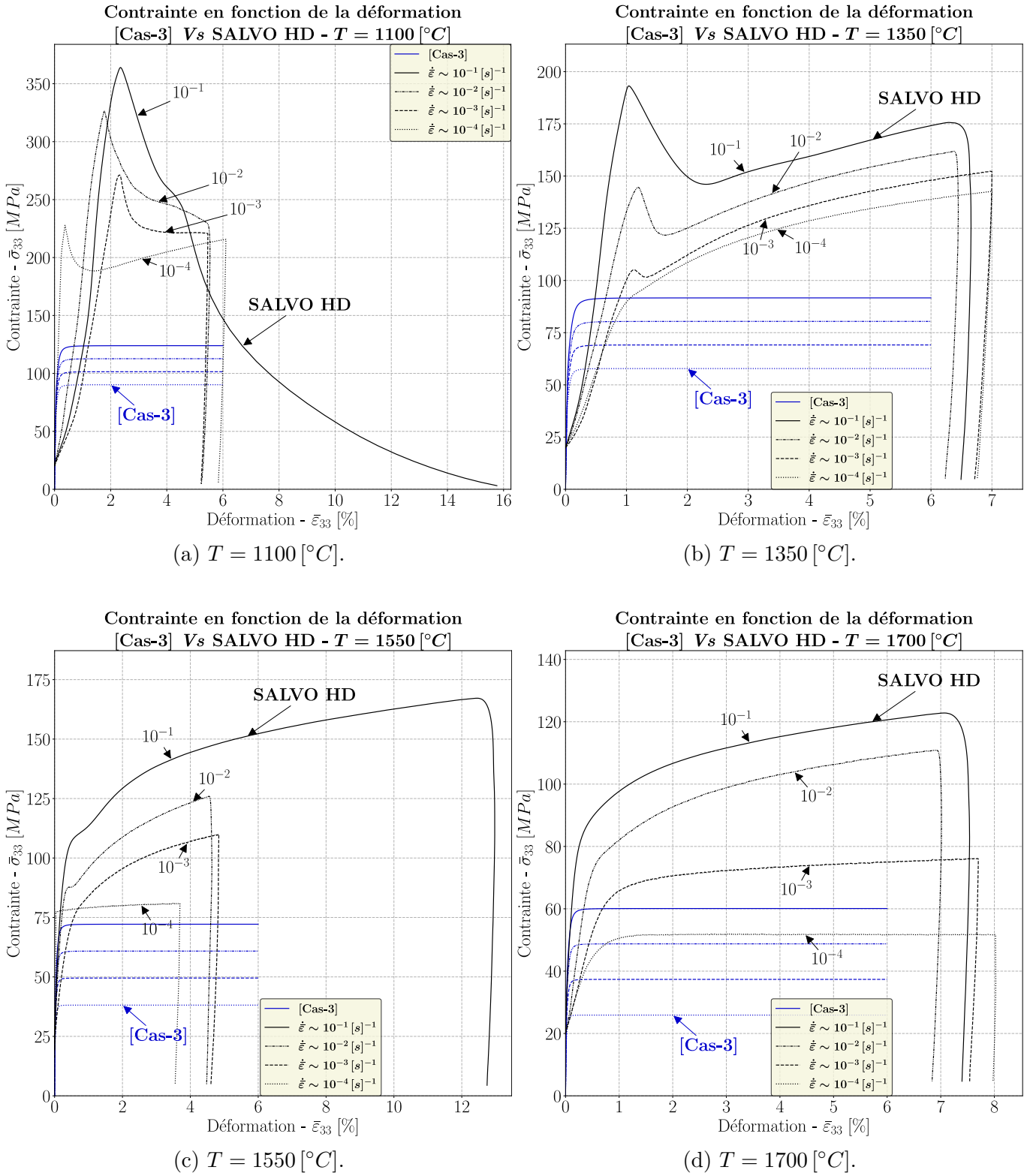
- ♢ La loi monocristalline est appelée dans chacun des voxels du polycristal. L'orientation de chaque grain est prise en compte.
- ♢ Cette loi n'est pas modifiée à proximité des joints de grains. L'hypothèse, faite ici, est que la réponse mécanique (déformations induites et contraintes) est principalement due aux mouvement des lignes de dislocations à l'intérieur du grain (mécanisme de franchissement de la barrière de Peierls éventuellement par double décrochement). Il n'y a pas d'interactions avec les joints de grains ou les grains voisins. Seules les incompatibilités de déformations entre grains sont prises en compte.
- ♢ Étant donné que le travail sur les monocristaux (calibration et validation réalisées dans le chapitre précédent) s'est fait vis-à-vis d'essais expérimentaux menés avec des échantillons ne présentant pas de porosité (échantillon $\rho = 100\,[\%]$), le [Cas-3] doit être comparé en priorité aux essais expérimentaux du lot forte densité ($\rho \sim 98.1\,[\%]$) de [**Salvo 2014**].

En s'appuyant sur les différents points mentionnés ci-dessus, le [Cas-3] est comparé dans un premier temps avec les résultats expérimentaux du lot forte densité (HD) [**Salvo 2014**]. Dans un deuxième temps le [Cas-3] est comparé avec les résultats expérimentaux du lot faible densité (REF FD) [**Salvo 2014**]. Il s'en suit une discussion sur les deux comparaisons effectuées.

Les courbes issues des résultats de [**Salvo 2014**] sont systématiquement en noir. Pour faciliter la lecture des résultats, les résultats sont regroupés par température (les quatre températures utilisées par [**Salvo 2014**]). Il y aura donc systématiquement quatre graphiques représentant les contraintes ($\bar{\sigma}_{33}\,[MPa]$) en fonction des déformations ($\bar{\varepsilon}_{33}\,[\%]$). Sur ces graphiques, les résultats issus des quatre vitesses de déformation utilisées par [**Salvo 2014**], sont affichés. Il en va de même pour les simulations numériques avec lesquelles les résultats expérimentaux de [**Salvo 2014**] sont comparés.

IV.2.1 [Cas-3] vis-à-vis du lot forte densité (HD) [Salvo 2014]

La comparaison du [Cas-3] (courbes en bleu) avec le lot forte densité de **[Salvo 2014]** est présentée sur la figure Fig. IV.3.



(a) $T = 1100\,[°C]$.

(b) $T = 1350\,[°C]$.

(c) $T = 1550\,[°C]$.

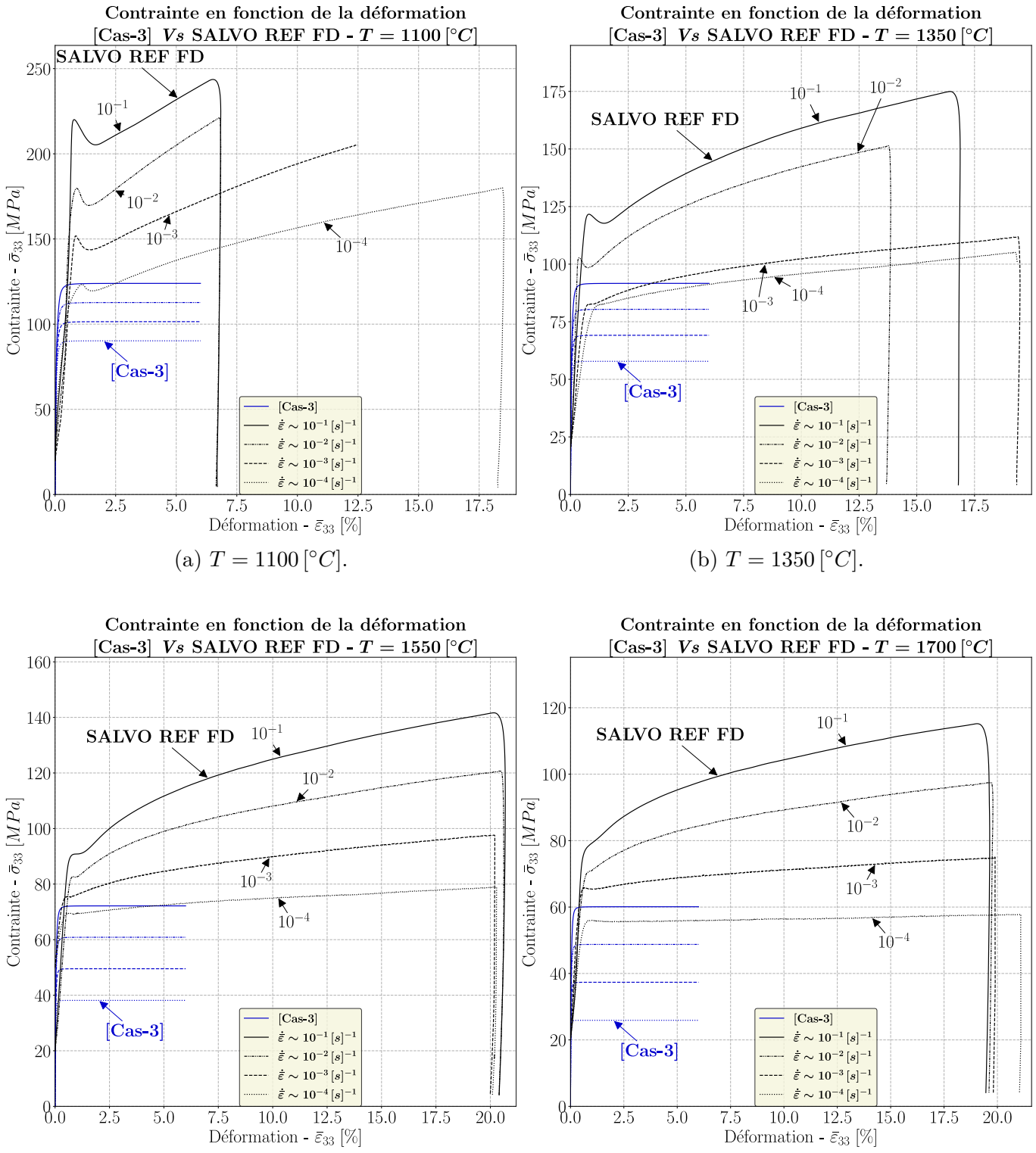
(d) $T = 1700\,[°C]$.

FIGURE IV.3 – Courbes contraintes-déformations : [Cas-3] *Vs* Lot Forte Densité (HD) **[Salvo 2014]**.

Les résultats sont sans ambiguïté. Les contraintes expérimentales sont largement sous-estimées. Il est fait mention ici de la contrainte d'entrée en visco-plasticité ou de la contrainte d'écoulement, ainsi que de l'état de contrainte macroscopique en général. L'écart relatif est de l'ordre de $\sim 40 - 50\,[\%]$

en prenant comme référence la réponse expérimentale. En particulier, les dépendances du [Cas-3] que ce soit à la température ou à la vitesse de déformation, ne rendent pas compte des résultats expérimentaux observés sur polycristaux.

IV.2.2 [Cas-3] vis-à-vis du lot faible densité (REF FD) [Salvo 2014]



(a) $T = 1100\,[°C]$. (b) $T = 1350\,[°C]$.

(c) $T = 1550\,[°C]$. (d) $T = 1700\,[°C]$.

FIGURE IV.4 – Courbes contraintes-déformations : [Cas-3] *Vs* Lot Faible Densité (REF FD) **[Salvo 2014]**.

La comparaison du [Cas-3] (courbes en bleu) avec le lot faible densité de **[Salvo 2014]** est

présentée sur la figure Fig. IV.4.

Les résultats sont, hélas, une nouvelle fois sans ambiguïté. Les contraintes expérimentales sont largement sous-estimées. Il est fait mention ici de la contrainte d'entrée en visco-plasticité ou de la contrainte d'écoulement, ainsi que de l'état de contrainte macroscopique en général. Les dépendances aux conditions de sollicitations que sont la température et la vitesse de déformation ne rendent pas compte des résultats expérimentaux observés sur polycristaux pour ce [Cas-3] étudié ici. Il est à noter que l'écart est moins important sur ce lot. Néanmoins, l'écart de densité entre la calibration et validation du [Cas-3] et le lot faible densité (REF FD) de [**Salvo 2014**] est plus important.

IV.2.3 Discussion vis-à-vis des résultats obtenus et stratégie de travail envisagée

Comme mentionné, les résultats ne sont pas satisfaisant pour le [Cas-3]. L'étude du [Cas-3] ne permet pas de rendre compte des résultats expérimentaux du lot forte densité de [**Salvo 2014**].

Devant cet écart important, quelques pistes de réflexions sont avancées. Il s'en suit la présentation de la stratégie envisagée pour palier cet écart.

Dans les conditions actuelles, il n'est pas possible de faire un remontage d'échelle (du monocristal vers le polycristal) en calibrant et validant une loi à l'échelle du monocristal et en l'utilisant directement au sein des polycristaux. Plusieurs pistes de réflexions peuvent être avancées :

- ♢ Les campagnes expérimentales sur monocristaux sont relativement anciennes. Les résultats à cette échelle ne sont pas clairs et sembleraient même s'exclure. Il faudrait reconduire des campagnes d'essais sur monocristaux afin de lever les interrogations. Le dioxyde d'uranium est un matériau qui comporte un nombre relativement important de paramètres qui peuvent impacter la réponse mécanique. Parmi ces paramètres, il est à retenir :
  - ▶ La gamme de températures balayée. Il est important de capter, dès cette échelle, l'influence de ce paramètre sur la réponse mécanique.
  - ▶ La gamme de vitesses de déformation balayée. Il est important de capter, dès cette échelle, l'influence de ce paramètre sur la réponse mécanique. Ce paramètre est d'autant plus important pour l'accident d'insertion de réactivité où les vitesses de déformation rencontrées sont comprises entre $\dot{\bar{\varepsilon}} \in [10^{-1}, 10]\,[s]^{-1}$. Il est à rappeler que les essais expérimentaux de compression uniaxée sur monocristaux sont effectués avec une vitesse de l'ordre de $\dot{\bar{\varepsilon}} \sim 10^{-4}\,[s]^{-1}$, vitesse qui est très loin de celles rencontrées en RIA.
  - ▶ Les orientations de l'axe de compression retenues. En effet il est important de choisir des orientations qui permettent de remonter aux contraintes résolues de cisaillement critique des trois familles (ou à minima des deux familles $\{\{100\}, \{110\}\}$). Il serait intéressant de balayer l'angle de compression Ω afin de clarifier les résultats sur cette orientation (pour rappel les résultats s'excluent entre [**Sawbridge et Sykes 1971**] d'un côté et [**Byron 1968a ; Mordike 1976**] d'un autre côté).
  - ▶ Étudier l'impact d'une déviation à la stoechiométrie en contrôlant parfaitement ce paramètre lors de l'essai.
  - ▶ Étudier éventuellement l'impact du batch de fabrication sur la réponse mécanique.
  - ▶ Étudier l'impact, si c'est possible, de la porosité à cette échelle. Il serait intéressant de voir si la réponse mécanique est sensible à ce paramètre.
  - ▶ Enfin, il pourrait éventuellement être intéressant d'étudier l'impact du joint de grain en effectuant des essais sur deux grains.
- ♢ Les essais sur polycristaux, bien que récents, sont trop peu fournis dans la littérature. D'un point de vue statistique, il n'est pas possible d'avoir un intervalle de confiance sur les essais polycristallins. Il est difficile de savoir si les essais de [**Salvo 2014**] sont bien représentatifs. Au vu de l'impact de la porosité sur la réponse mécanique obtenue par [**Salvo 2014**] (comparaison

lot forte et faible densité), il est possible qu'il se passe des phénomènes physiques locaux non négligeables. Il serait particulièrement intéressant de réaliser des essais sur des polycristaux non poreux et poreux : la fraction volumique de porosité étant dès lors parfaitement connue expérimentalement.

Devant cet écart important il est apparu nécessaire de changer l'approche effectuée pour avoir une réponse effective en accord avec les données expérimentales de cette échelle. Les données expérimentales de [**Ben Saada 2017**] (cf. Tab. IV.2) sont intégrées à l'étude. Afin de pouvoir rendre compte des essais expérimentaux de [**Salvo 2014 ; Ben Saada 2017**], il est apparu nécessaire de faire une identification inverse de la loi monocristalline. L'identification inverse est basée uniquement sur des résultats expérimentaux observés à l'échelle polycristalline.

La principale difficulté de l'identification inverse est de faire le lien entre des entités mesurables expérimentalement, c'est-à-dire des entités définies à l'échelle polycristalline, et des entités locales permettant de définir la loi locale visco-plastique (échelle monocristalline). En se basant uniquement sur des résultats issus des polycristaux, il apparait compliqué de calibrer la loi locale, précédemment utilisée, en température et en vitesse de déformation du fait des différences de comportement observées expérimentalement vis-à-vis des conditions de sollicitation [**Salvo 2014 ; Ben Saada 2017**]. De plus, certaines valeurs numériques des coefficients préalablement introduits ne sont pas physiques. En réponse à ces différentes remarques, le formalisme de la loi locale est modifié et simplifié. L'idée est de se laisser plus de libertés dans la forme des coefficients, ce qui permet d'améliorer le processus d'identification inverse et de retrouver des valeurs numériques acceptables. De plus, il est rappelé que la loi locale est appliquée dans l'ensemble des grains sans modifications. Il apparait clairement qu'à l'échelle polycristalline, le comportement mécanique est impacté par le grain et également par les grains voisins. De ce fait, il semble pertinent d'introduire de l'empirisme dans la loi locale tout en la simplifiant. Le formalisme adopté (cf. Eq. IV.1) s'inspire des travaux de [**Knezevic et al. 2013**]. Le but visé est de retrouver le comportement asymptotique obtenu expérimentalement. Après observation, la loi locale est prise élasto viscoplastique avec écrouissage isotrope.

$$\dot{\gamma}_s^{\mathsf{vp}} = \dot{\gamma}_i^0 \left(\frac{|\boldsymbol{\tau}_s|}{r_i}\right)^{n_i} sgn\left(\boldsymbol{\tau}_s\right)$$

Avec :

r_i	$= \boldsymbol{\tau}_i^0(T,\dot{\bar{\varepsilon}}) + h_i(T,\dot{\bar{\varepsilon}})\, p_i$
$\dot{p}_i$	$= \sum_{s\in S_i} \dot{\gamma}_s^{\mathsf{p}},\ \dot{\gamma}_s^{\mathsf{p}} = \lvert\dot{\gamma}_s^{\mathsf{vp}}\rvert$
i	l'ensemble des familles de glissement, $i \in \{\{100\},\{110\}\}$
S_i	l'ensemble des systèmes de glissement appartenant à la famille i
s	l'ensemble des systèmes de glissement

(IV.1)

Avec :

- $\dot{\gamma}_s^{\mathsf{vp}}$ loi d'évolution inspirée de [**Knezevic et al. 2013**]
- $\left(\boldsymbol{\tau}_i^0, h_i\right)(T,\dot{\bar{\varepsilon}})$ fonctions à déterminer et à identifier.

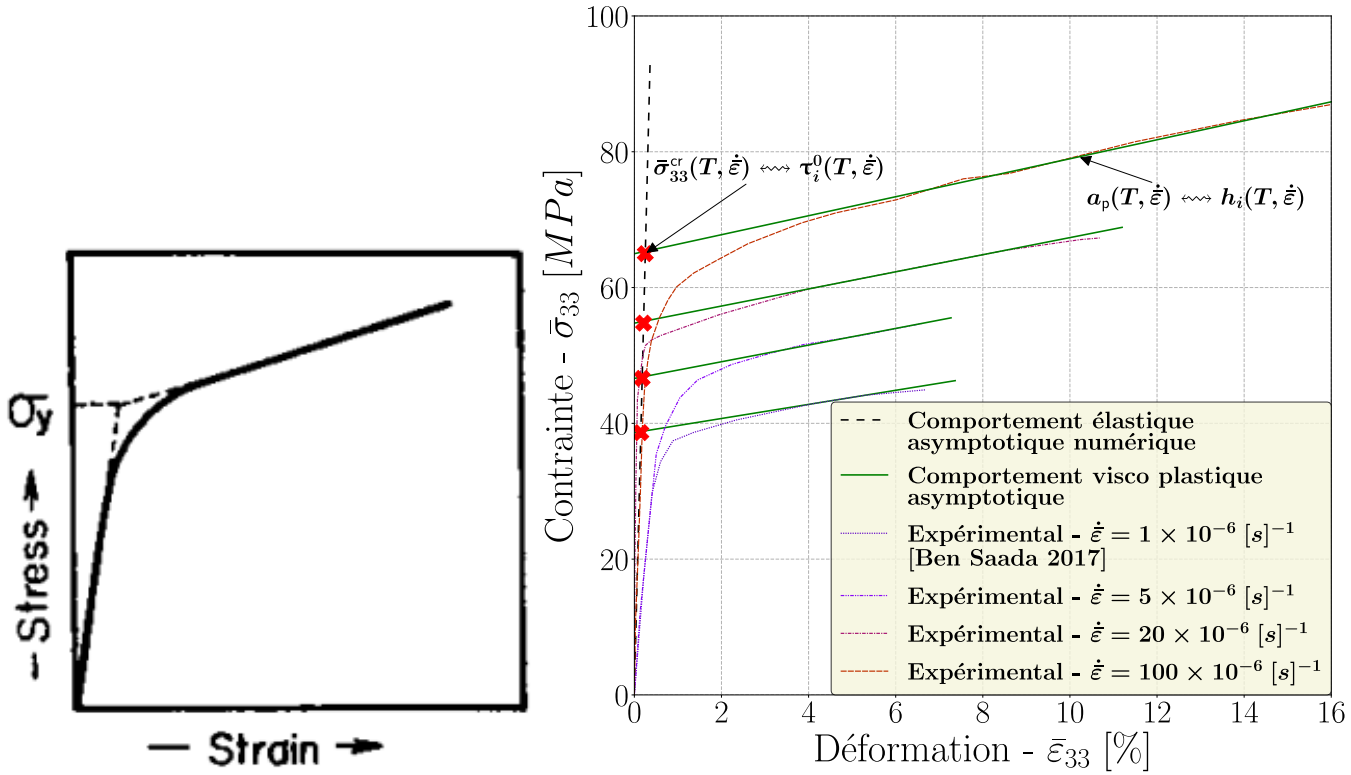
Il est rappelé que le processus d'identification inverse s'effectue sur les données expérimentales de [**Salvo 2014 ; Ben Saada 2017**] qui effectuent des essais de compression uniaxés à différentes vitesses de déformation macroscopiques imposées et pour différentes températures. La principale difficulté est de faire un lien entre des quantités mesurables à l'échelle polycristalline et les coefficients intervenant dans la loi locale. Le processus d'identification inverse utilisé se décompose en deux étapes.

♢ Identification du coefficient $\boldsymbol{\tau}_i^0$ (cf. Eq. IV.1) via la définition, la détermination et l'utilisation de la contrainte dite de « croisement ». Cette dernière est illustré par σ_{y} (Fig. IV.5 :(a)) et par $\bar{\sigma}_{33}^{\mathsf{cr}}$ (Fig. IV.5 :(b), croix rouges).

- ▶ La contrainte de « croisement » est définie comme la contrainte correspondant à la déformation pour laquelle la droite issue de l'élasticité numérique croise la droite issue de l'écrouissage asymptotique. La partie élastique des essais expérimentaux de **[Salvo 2014 ; Ben Saada 2017]** ne semble pas représentative du comportement du dioxyde d'uranium. En particulier, les pentes d'élasticité sont beaucoup trop faibles par rapport au module d'Young de ce matériau (il n'est pas possible de déduire directement le module lors d'un essai de compression du fait de l'anisotropie élastique, néanmoins la pente est bien inférieure à la borne basse de ce paramètre). C'est pourquoi la droite issue de l'élasticité est prise via les simulations numériques.

♢ Identification du coefficient h_i (cf. Eq. IV.1) via la définition, la détermination et l'utilisation de la pente d'écrouissage asymptotique. Cette dernière est illustré par le coefficient a_{p} (Fig. IV.5 :(b), droite trait plein en vert).

- ▶ L'écrouissage asymptotique : intervalle de déformations plus ou moins important sur lequel la pente d'écrouissage ne varie pas (c'est-à-dire que le coefficient de corrélation R, coefficient issu de la régression linéaire, est proche de l'unité).



(a) Illustration tirée de **[Tachibana et al. 1976]**

(b) Détermination de la contrainte de croisements a posteriori d'essais expérimentaux menés à l'échelle polycristalline. **[Ben Saada 2017]**

FIGURE IV.5 – Illustration de la définition de la contrainte de croisement.

Une fois identifiée, des simulations en champ complet de type FFT sur un VER polycrallin sont effectuées et confrontées aux résultats des essais expérimentaux de **[Salvo 2014 ; Ben Saada 2017]**, et ce, pour les mêmes conditions de chargement. Si les résultats sont en bonne adéquation il s'ensuit le développement du modèle d'ordre réduit de type NTFA.

IV.3 Identification inverse de la loi locale sur les essais expérimentaux polycristallin de [Salvo 2014] lot faible densité et [Ben Saada 2017]

L'ensemble des simulations numériques, à cette échelle polycristalline, se fait sous l'hypothèse des petites perturbations (HPP). Le travail d'identification inverse porte sur le [Cas-3] c'est-à-dire le cas comportant seulement deux familles $i \in \{\{100\},\ \{110\}\}$. Les données expérimentales utilisées proviennent des essais de [**Salvo 2014**] lot faible densité et [**Ben Saada 2017**]. Il est à rappeler que les essais réalisés sont des essais de compression uniaxés à vitesse de déformation imposée et pour différentes températures. Un algorithme piloté en déformation et à direction de contrainte imposée est utilisé. Durant la simulation, la température est prise constante sur le VER. La déformation finale de l'essai numérique $\bar{\varepsilon}_{33}$ est prise proche de la déformation finale atteinte expérimentalement pour le même cas de chargement. Le temps final de l'essai t_f est fixé de sorte d'avoir la bonne vitesse de déformation par $\dot{\bar{\varepsilon}}_{33} = \dfrac{\bar{\varepsilon}_{33}}{t_\mathsf{f}}$. Le nombre d'incréments N_{Incr} est fixé dans l'ensemble des simulations à $N_{\mathsf{Incr}} = \dfrac{\bar{\varepsilon}_{33} 10^5}{20}$ avec $\bar{\varepsilon}_{33}$ $[-]$ la déformation finale de l'essai.

Le problème mécanique ainsi que le formalisme de la loi monocristalline sous l'hypothèse HPP sont rappelés Eq. IV.2. Il s'ensuit l'identification du coefficient τ_i^0 qui s'appuie sur la définition de la contrainte de croisement, puis l'identification du coefficient h_i qui s'appuie sur la définition de la pente d'écrouissage asymptotique. Enfin, les résultats issus des simulations numériques en champ complet FFT sont comparés aux résultats expérimentaux de [**Salvo 2014**] lot faible densité et [**Ben Saada 2017**].

$$
(\mathcal{P}) \begin{cases} div(\boldsymbol{\sigma}) = 0 & \text{dans V} \\ \boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{L} : \boldsymbol{\varepsilon}_\mathsf{e}(u),\ \boldsymbol{\varepsilon}_\mathsf{e}(u) = \boldsymbol{\varepsilon}(u) - \boldsymbol{\varepsilon}_\mathsf{vp}(u) & \text{dans V} \\ \boldsymbol{u} - \langle \boldsymbol{\varepsilon}(u) \rangle \cdot \boldsymbol{x} & \#\text{ sur } \partial V \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n} & \text{-}\#\text{ sur } \partial V \\ \langle \boldsymbol{\varepsilon}(u) \rangle = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \end{cases}
$$

Où : | # désigne les conditions périodiques, | -# désigne les conditions antipériodiques.

Avec : $\boldsymbol{\varepsilon}_\mathsf{vp} = \sum_s \gamma_s \boldsymbol{m_s}$

Et :

$\boldsymbol{m_s} = \boldsymbol{b_s} \otimes \boldsymbol{n_s}$	Tenseur de Schmid du système s.	(IV.2)
$\boldsymbol{n_s}$	Normale au plan de glissement du système s.	
$\boldsymbol{b_s}$	Direction othogonale à la ligne de dislocation engendrant le plan de glissement du système s.	
γ_s	Cisaillement propre au système s.	

$$
\dot{\gamma}_s^{\mathsf{vp}} = \dot{\gamma}_i^0 \left(\frac{|\tau_s|}{r_i} \right)^{n_i} sgn\left(\tau_s\right)
$$

Avec :

$$
\begin{aligned} r_i &= \tau_i^0(T, \dot{\bar{\varepsilon}}) + h_i(T, \dot{\bar{\varepsilon}}) \times p_i \\ \dot{p}_i &= \sum_{s \in S_i} \dot{\gamma}_s^{\mathsf{p}},\ \dot{\gamma}_s^{\mathsf{p}} = |\dot{\gamma}_s^{\mathsf{vp}}| \end{aligned}
$$

IV.3.1 Identification du coefficient $\tau_i^0(T, \dot{\bar{\varepsilon}})$

Il est à remarquer que la contrainte de croisement ainsi définie est indépendante de la pente d'écrouissage. Autrement dit, si un essai expérimental est considéré (cf. Fig. IV.5 :(b) par exemple), l'expérimentateur relève une certaine pente d'écrouissage. Ceci permet de calculer la contrainte de croisement. Cette contrainte serait la même si l'expérimentateur avait obtenu une pente nulle pour l'essai considéré. Cette indépendance permet de dissocier deux étapes de travail. La première porte sur le coefficient τ_i^0, la deuxième porte sur le coefficient h_i. Du fait de l'indépendance de τ_i^0 vis-à-vis de l'écrouissage, le coefficient h_i est pris nul dans cette sous-section. La contrainte de croisement est donc confondue, dans ce cas particulier, avec la contrainte relevée dans le régime viscoplastique asymptotique.

Avant tout travail, il est à remarquer qu'il existe une infinité de couples $(\tau_{\{100\}}^0, \tau_{\{110\}}^0)$ qui donnent la même contrainte de croisement $\bar{\sigma}_{33}^{\mathsf{cr}}$. Pour palier à ce problème, l'idée est de fixer la fonction $\tau_{\{100\}}^0(T, \dot{\bar{\varepsilon}})$ et d'en déduire, aux conditions de sollicitation disponibles, la valeur de $\tau_{\{110\}}^0(T, \dot{\bar{\varepsilon}})$ qui assure que la contrainte de croisement obtenue numériquement est égale à la contrainte de croisement obtenue expérimentalement.

De plus, plusieurs coefficients de la loi locale sont déduits, en particulier l'exposant n_i et le pré-facteur $\dot{\gamma}_i^0$. L'exposant n_i, qui est pris égal pour les deux familles, est déduit des observations expérimentales. En s'inspirant des travaux de **[Knezevic et al. 2013]**, le pré-facteur est pris fonction de la déformation macroscopique $\dot{\gamma}_i^0(\dot{\bar{\varepsilon}})$. Ce dernier terme est déterminé en effectuant des simulations numériques de compression uniaxés à vitesse de déformation imposée sur un monocristal et ceci pour une orientation qui ne mobilise qu'un seul système de glissement. Le terme $\dot{\gamma}_i^0(\dot{\bar{\varepsilon}})$ est pris égal à la vitesse de déformation obtenue sur le système mobilisé. Les valeurs sont présentées Eq. IV.3.

$$\left\| \begin{array}{l} n_{\{100\}} = 4 \\ \dot{\gamma}_{\{100\}} = 0.7\ \dot{\bar{\varepsilon}} \end{array} \right. \quad \left\| \begin{array}{ll} n_{\{110\}} = 4 & [-] \\ \dot{\gamma}_{\{110\}} = 0.5\ \dot{\bar{\varepsilon}} & [s]^{-1} \end{array} \right. \tag{IV.3}$$

En observant Fig. IV.4, il apparait un écart important à combler. Afin de ne pas faire porter la correction exclusivement sur la famille $\{110\}$ via la détermination des données puis l'identification de la fonction $\tau_{\{110\}}^0(T, \dot{\bar{\varepsilon}})$, une correction (cf. Eq. IV.4) est effectuée sur les données de la famille $\{100\}$. Ces données permettent de postuler un certain formalisme pour la fonction $\tau_{\{100\}}^0(T, \dot{\bar{\varepsilon}})$. Enfin l'algorithme de **[Levenberg 1944 ; Marquardt 1963]** est utilisé pour déterminer les coefficients composant la fonction $\tau_{\{100\}}^0(T, \dot{\bar{\varepsilon}})$.

$$\tau_{\{100\}}^{0,\mathsf{f}}(T, \dot{\bar{\varepsilon}}) = \tau_{\{100\}}^{0,\mathsf{CosH}}(T, \dot{\bar{\varepsilon}}) + f_s\ \Delta\bar{\sigma}_{33}^{\mathsf{cr}}(T, \dot{\bar{\varepsilon}})$$

Avec :

- $\Delta\bar{\sigma}_{33}^{\mathsf{cr}}$ écart entre la contrainte de croisement numérique obtenue par calcul en champ complet FFT et celle relevée expérimentalement
- $\tau_{\{100\}}^{0,\mathsf{CosH}} = \tau_i^0 \times arccosh\left[1 + \dfrac{\dot{\bar{\varepsilon}}_{\mathsf{t}}}{f_s \rho_s^{\mathsf{m}} \nu_D b^2 \times exp\left(-\frac{\Delta H_i^0}{k_{\mathsf{b}} T}\right)}\right]$
- $\tau_{\{100\}}^{0,\mathsf{f}}$ données d'entrées utilisées dans l'algorithme LM **[Levenberg 1944 ; Marquardt 1963]**
- $f_s = 0.5$, facteur de Schmidt

(IV.4)

En se basant sur les données $\tau_{\{100\}}^{0,\mathsf{f}}(T, \dot{\bar{\varepsilon}})$, une certaine fonction de $\tau_{\{100\}}^0(T, \dot{\bar{\varepsilon}})$ est postulée.

$$\tau^0_{\{100\}}(T,\dot{\bar{\varepsilon}}) = A_{\{100\}}(\dot{\bar{\varepsilon}})\ exp\left(-b_{\{100\}}\ T\right)$$
$$A_{\{100\}}(\dot{\bar{\varepsilon}}) = a^0_{\{100\}}\ log_{10}(\dot{\bar{\varepsilon}}) + a^1_{\{100\}}$$

Avec :

$\tau^0_{\{100\}}$	fonction cible
$\tau^{0,\mathsf{f}}_{\{100\}}$	données d'entrées utilisées dans l'algorithme LM
$(A_{\{100\}}(\dot{\bar{\varepsilon}}), b_{\{100\}})$	coefficients déterminés en utlisant l'algorithme *LM* **[Levenberg 1944 ; Marquardt 1963]**

(IV.5)

Où :

$a^0_{\{100\}}$	$= 19.49711133$	$[MPa]$
$a^1_{\{100\}}$	$= 202.42143199$	$[MPa]$
$b_{\{100\}}$	$= 1.21548301\ 10^{-3}$	$[°C]^{-1}$

À ce stade, la fonction $\tau^0_{\{100\}}(T,\dot{\bar{\varepsilon}})$ est déterminée via Eq. IV.5. Il reste à déterminer $\tau^0_{\{110\}}(T,\dot{\bar{\varepsilon}})$ donnant la contrainte de croisement relevée expérimentalement pour les conditions de sollicitation balayées dans les études de **[Salvo 2014 ; Ben Saada 2017]**. Dans ce but le processus itératif suivant Eq. IV.6 est adopté.

$$\tau^{0,(n+1)}_{\{110\}}(T,\dot{\bar{\varepsilon}}) = \frac{\sigma^{\mathsf{cr}}_{\mathsf{exp}}(T,\dot{\bar{\varepsilon}})}{\sigma^{\mathsf{cr},(n)}_{\mathsf{num}}(T,\dot{\bar{\varepsilon}})}\ \tau^{0,(n)}_{\{110\}}(T,\dot{\bar{\varepsilon}}),\ \ |\sigma^{\mathsf{cr},(n)}_{\mathsf{num}} - \sigma^{\mathsf{cr}}_{\mathsf{exp}}| < \delta\ \sigma^{\mathsf{cr}}_{\mathsf{exp}}$$

Avec :

$\sigma^{\mathsf{cr}}_{\mathsf{exp}}$	contrainte de croisement expérimentale
$\sigma^{\mathsf{cr},(n)}_{\mathsf{num}}$	contrainte de croisement numérique à l'itération (n)
$\delta(=10^{-3})$	critère d'arrêt relatif
$\tau^{0,(n+1)}_{\{110\}}$	coefficient de la loi locale à l'itération $(n+1)$

(IV.6)

$$\tau^0_{\{110\}}(T,\dot{\bar{\varepsilon}}) = A_{\{110\}}(\dot{\bar{\varepsilon}})\ exp\left(-b_{\{110\}}\ T\right)$$
$$A_{\{110\}}(\dot{\bar{\varepsilon}}) = a^0_{\{110\}}\ log_{10}(\dot{\bar{\varepsilon}}) + a^1_{\{110\}}$$

Avec :

$\tau^0_{\{110\}}$	fonction cible
$\tau^{0,(n)}_{\{110\}}$	données d'entrées utilisées dans l'algorithme LM
	données issues de la sortie du processus itératif
$(A_{\{110\}}(\dot{\bar{\varepsilon}}), b_{\{110\}})$	coefficeints déterminés en utilisant l'algorithme LM **[Levenberg 1944 ; Marquardt 1963]**

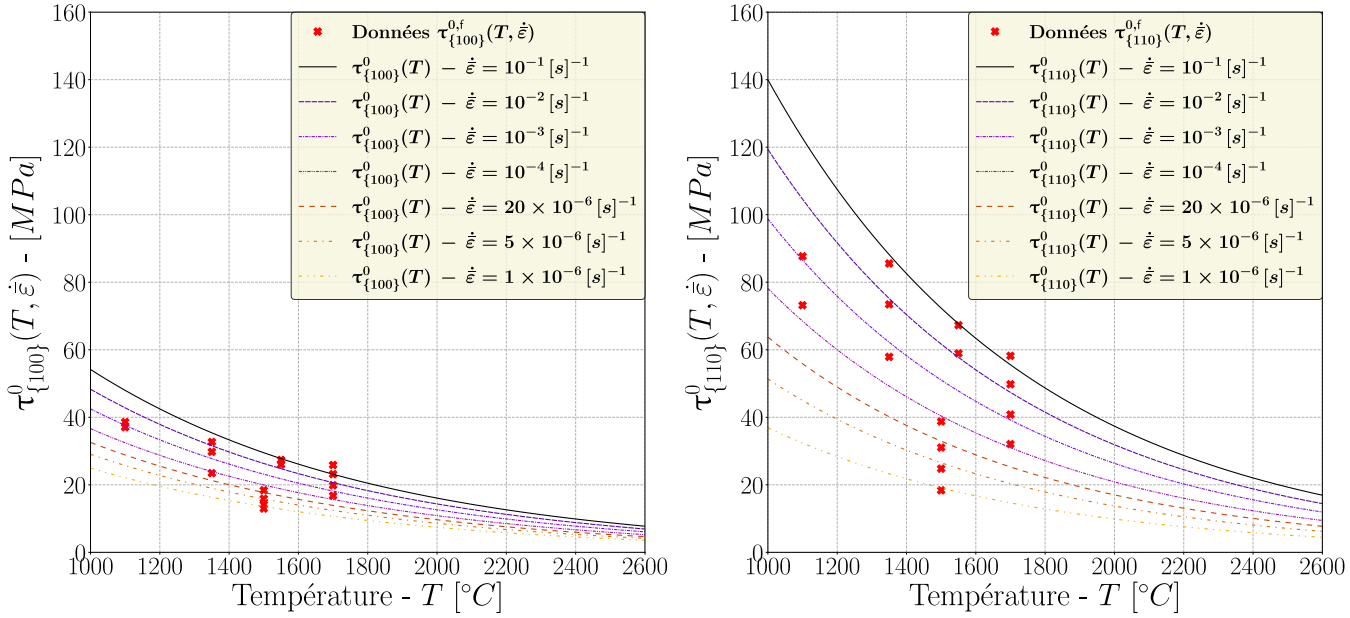
(IV.7)

Où :

$a^0_{\{110\}}$	$= 77.18803512$	$[MPa]$
$a^1_{\{110\}}$	$= 601.46741726$	$[MPa]$
$b_{\{110\}}$	$= 1.32047924\ 10^{-3}$	$[°C]^{-1}$

Les données obtenues suite à l'utilisation de Eq. IV.4 pour la famille $\{100\}$ et du processus itératif Eq. IV.6 pour la famille $\{110\}$, sont illustrées Fig. IV.6 croix rouges. Sur ces mêmes figures sont illustrées les variations des fonctions $\left(\tau^0_{\{100\}},\ \tau^0_{\{110\}}\right)(T)$ pour quelques vitesses de déformation, fonctions dont les coefficients sont déterminés en utilisant l'algorithme de **[Levenberg 1944 ; Marquardt 1963]**. Les valeurs numériques des coefficients sont précisées Eq. IV.5 et Eq. IV.7.

À ce stade les coefficients $\left(\tau^0_{\{100\}},\ \tau^0_{\{110\}}\right)$ intervenant dans la loi d'évolution Eq. IV.2 sont entièrement déterminés. Il reste à déterminer le coefficient h_i.



(a) Données famille {100}

(b) Données famille {110}

FIGURE IV.6 – Variation de $\left(\tau^0_{\{100\}},\ \tau^0_{\{110\}}\right)(T)$ pour quelques vitesses de déformation, où les coefficients sont déterminés en utilisant l'algorithme de **[Levenberg 1944 ; Marquardt 1963]**.

IV.3.2 Identification du coefficient $h_i(T,\dot{\bar{\varepsilon}})$

À l'échelle du monocristal, les courbes contraintes déformations ne présentent pas d'écrouissage dans la gamme de température étudiée ici. Cet écrouissage semblerait provenir de l'échelle polycristalline avec la présence des joints de grains et des grains voisins. Étant donnée qu'il n'existe pas de données concernant l'écrouissage, ce coefficient est pris égal pour ces deux familles $h_{\{100\}} = h_{\{110\}}$. Dans la suite, ce coefficient est dénommé h avec $h = h_{\{100\}}$.

Il reste à déterminer $h(T,\dot{\bar{\varepsilon}})$ donnant la pente d'écrouissage relevée expérimentalement pour les conditions de sollicitation balayées dans les études de **[Salvo 2014 ; Ben Saada 2017]**. Dans ce but le processus itératif suivant Eq. IV.8 est adopté.

$$h^{(n+1)}(T,\dot{\bar{\varepsilon}}) = \frac{a_{\mathsf{p,exp}}(T,\dot{\bar{\varepsilon}})}{a^{(n)}_{\mathsf{p,simu}}(T,\dot{\bar{\varepsilon}})}\, h^{(n)}(T,\dot{\bar{\varepsilon}}),\ \ |a^{(n)}_{\mathsf{p,simu}} - a_{\mathsf{p,exp}}| < \delta\, a_{\mathsf{p,exp}},$$

Avec :

$a_{\mathsf{p,exp}}$	pente d'écrouissage expérimentale
$a^{(n)}_{\mathsf{p,simu}}$	pente d'écrouissage numérique à l'itération (n)
$\delta(=10^{-4})$	critère d'arrêt relatif

$$h(T,\dot{\bar{\varepsilon}}) = \frac{a^{\mathsf{h}} \times ln\left(b^{\mathsf{h}} \times \dot{\bar{\varepsilon}} + f^{\mathsf{h}}\right)}{\left(c^{\mathsf{h}} \times T + d^{\mathsf{h}}\right)^{e^{\mathsf{h}}}}, \tag{IV.8}$$

Avec :

$h^{(n)}$	données d'entrées utilisées dans l'algorithme LM
	données issues de la sortie du processus itératif
$(a^{\mathsf{h}}, b^{\mathsf{h}}, c^{\mathsf{h}}, d^{\mathsf{h}}, e^{\mathsf{h}}, f^{\mathsf{h}})$	coefficients déterminés en utilisant l'algorithme LM **[Levenberg 1944 ; Marquardt 1963]**.

Où :

a^{h}	$= 1.01600268\ 10^5$	$[MPa]$	d^{h}	$= 1.21527632\ 10^{-1}$	$[-]$
b^{h}	$= 3.76964964\ 10^5$	$[s]^{-1}$	e^{h}	$= 5.$	$[-]$
c^{h}	$= 4.99210510\ 10^{-3}$	$[°C]^{-1}$	f^{h}	$= 2.58830822\ 10^2$	$[-]$

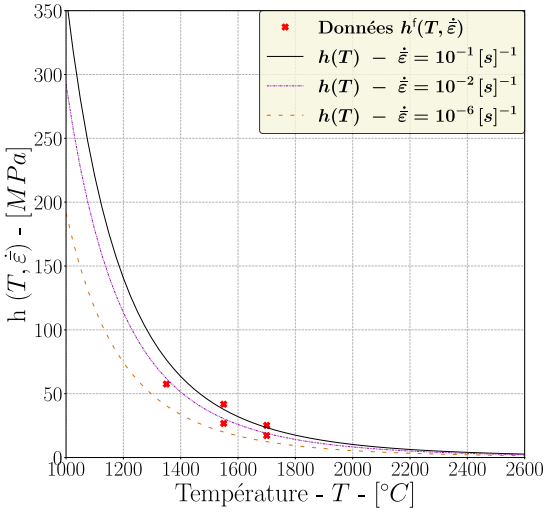


FIGURE IV.7 – Variation de $h(T)$ pour quelques vitesses de déformations, où les coefficients sont déterminés en utilisant l'algorithme de [**Levenberg 1944 ; Marquardt 1963**].

Les données obtenues suite à l'utilisation du processus itératif Eq. IV.8, sont illustrées Fig. IV.7 croix rouges. Il est à noter que peu de données sont utilisées pour la détermination des coefficients constituant la fonction $h(T,\dot{\varepsilon})$. Cela s'explique simplement dans l'observation de différences de comportement entre les études de [**Salvo 2014**] et [**Ben Saada 2017**]. En effet, pour une gamme de vitesses de déformation relativement proche il est observé deux comportements différents. D'un côté la pente d'écrouissage décroit et semble converger vers 0 lorsque la vitesse de déformation diminue (cf. [**Salvo 2014**] lot faible densité), alors que d'un autre coté, la pente d'écrouissage semble être insensible à une variation de vitesse de déformation (cf. [**Ben Saada 2017**]). Étant dans l'impossibilité de trancher, seules les données à fortes vitesses sont gardées.

Sur cette figure est illustrée la variation de la fonction $h(T)$ pour quelques vitesses de déformation, fonction dont les coefficients sont déterminés en utilisant l'algorithme de [**Levenberg 1944 ; Marquardt 1963**]. Les valeurs numériques des coefficients sont précisées Eq. IV.8.

La loi d'évolution Eq. IV.2 est entièrement déterminée. Il est possible de comparer la réponse numérique en champ complet FFT vis-à-vis des essais expérimentaux disponibles [**Salvo 2014 ; Ben Saada 2017**] pour vérifier l'efficacité ou non du processus d'identification inverse adopté.

IV.3.3 Comparaison des résultats obtenus par simulation numérique en champ complet FFT avec la loi calibrée vis-à-vis des résultats expérimentaux de [Salvo 2014](REF FD) et [Ben Saada 2017]

Dans l'ensemble des comparaisons, les essais menés sont des essais de compression uniaxés à vitesse de déformation imposée et pour différentes températures. Les résultats numériques issus du modèle en champ complet FFT (couleurs) sont comparées aux résultats expérimentaux de [**Salvo 2014 ; Ben Saada 2017**] (en noir).

Avant de comparer le modèle en champ complet et les résultats expérimentaux, il est bon de faire quelques observations sur les résultats expérimentaux. La figure Fig. IV.9 permet d'observer à l'oeil l'impact d'une variation de température sur les résultats expérimentaux obtenus. Il semblerait qu'une variation de température ait un effet plus important dans le domaine des basses températures. Cet impact paraît décroître à mesure que la température augmente. Toujours sur Fig. IV.9, il semblerait qu'une variation de vitesse de déformation macroscopique ait plus d'impact dans le domaine des basses températures. Enfin, en comparant les résultats expérimentaux de Fig. IV.9 [**Salvo 2014**] et Fig. IV.8 [**Ben Saada 2017**], en ayant en tête que l'échelle des graphiques n'est pas tout à fait la même, il est possible de remarquer que dans un cas les pentes d'écrouissages tendent vers 0 à mesure

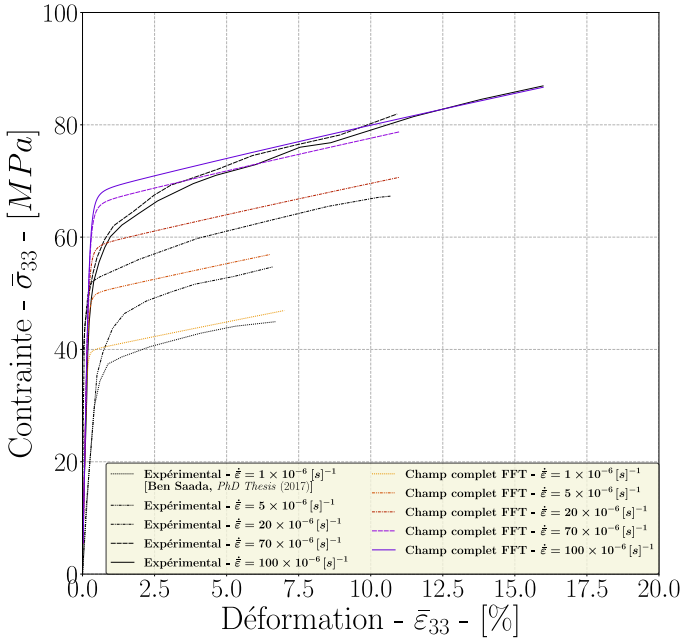


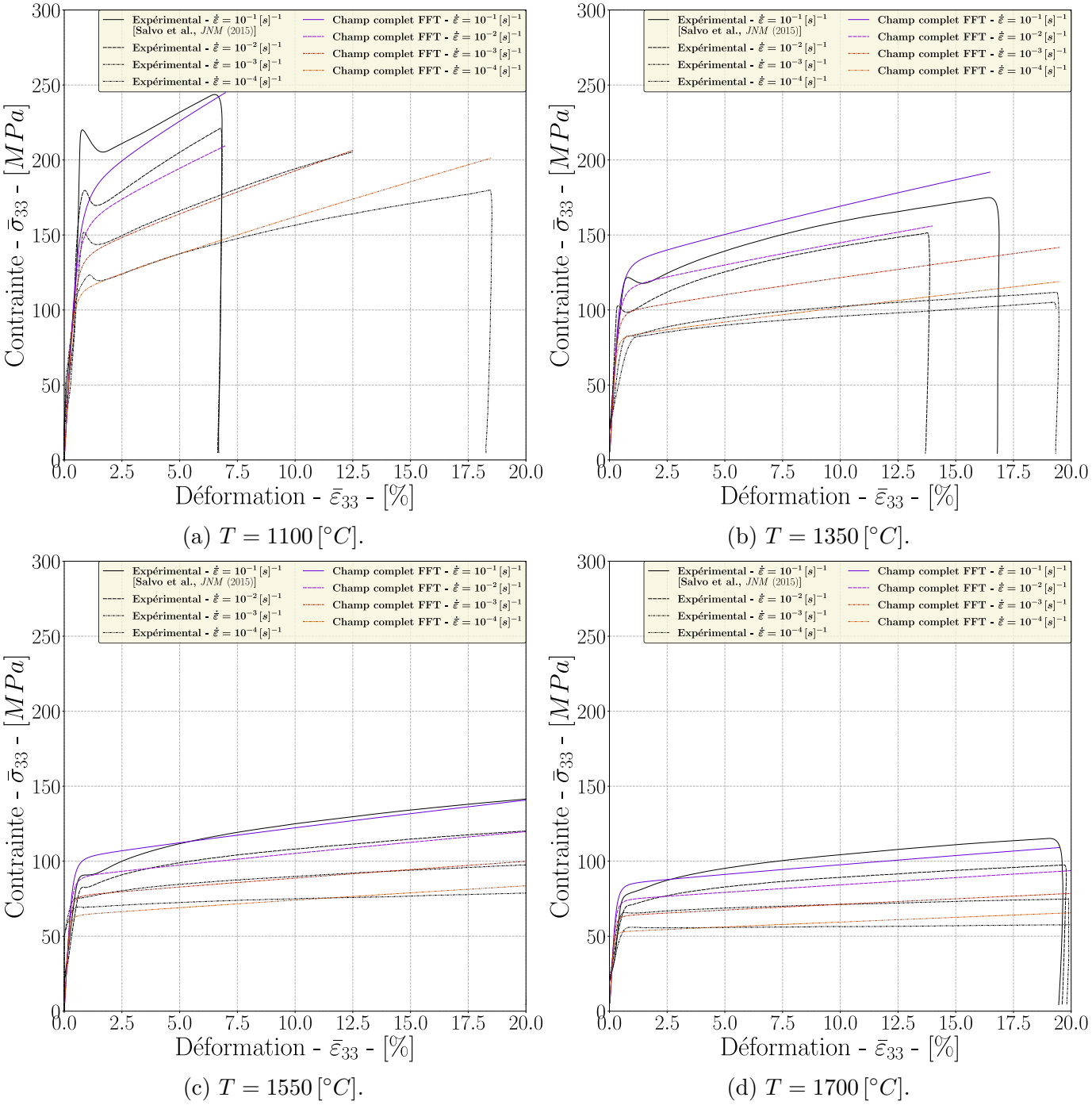
FIGURE IV.8 – Variation de la contrainte $\bar{\sigma}_{33}$ en fonction de la déformation $\bar{\varepsilon}_{33}$ dans la direction de sollicitation et pour quelques vitesses de déformation avec $T = 1500\,[°C]$. Comparaison du modèle en champ complet FFT issu du processus d'identification inverse avec les données expérimentales de [**Ben Saada 2017**].

que la température augmente ou que la vitesse diminue Fig. IV.9 [**Salvo 2014**]. Alors que dans l'autre cas Fig. IV.8 [**Ben Saada 2017**], la pente d'écrouissage paraît indépendante de la vitesse de déformation.

Pour ce qui est de la comparaison entre le modèle en champ complet FFT calibré de manière inverse et les résultats expérimentaux, il est rappelé que le but de l'identification inverse est de ne retrouver que le comportement asymptotique.

Comme il est possible de le voir sur Fig. IV.8 et Fig. IV.9, les pics de contrainte et le coude ne sont pas bien décrit par le modèle comparativement aux résultats expérimentaux étudiés. Néanmoins, de manière générale, les résultats numériques obtenus avec le modèle en champ complet FFT est en très bon accord avec les résultats de [**Ben Saada 2017**] comme attesté par Fig. IV.8 et en relativement bon accord avec les résultats expérimentaux de [**Salvo 2014**] comme attesté par Fig. IV.9. Sur cette dernière comparaison, il est observé des écarts qui peuvent être imputés à différents phénomènes. Le premier est que la loi ne peut pas rendre compte du pic de contrainte observé dans certains cas et notamment dans le domaine des basses températures. Le deuxième est qu'il est observé une certaine variabilité des résultats, notamment Fig. IV.9 :(b). Cette variabilité n'est pas prise en compte dans le modèle. Le troisième, mentionné précédemment, concerne le choix fait sur la pente d'écrouissage, pente qui est prise décroissante lorsque la température augmente et la vitesse de déformation diminue et qui converge vers une valeur supérieure à 0. Enfin, [**Salvo 2014**] observe un endommagement de sa structure. Le modèle ne prend pas en compte d'endommagement.

Malgré les diverses remarques, la loi locale identifiée de manière inverse est jugée pertinente. Elle semble pouvoir rendre compte à la fois d'une variation de température ou de vitesse de déformation conséquente à l'échelle du polycristal. La loi est jugée suffisamment précise pour développer un modèle d'ordre réduit de type NTFA. Ceci fait l'objet de la dernière partie de ce document.



(a) $T = 1100\,[°C]$. (b) $T = 1350\,[°C]$.

(c) $T = 1550\,[°C]$. (d) $T = 1700\,[°C]$.

FIGURE IV.9 – Variation de la contrainte $\bar{\sigma}_{33}$ en fonction de la déformation $\bar{\varepsilon}_{33}$ dans la direction de sollicitation et pour quelques cas de chargements en températures et vitesses de déformations. Comparaison du modèle en champ complet FFT issu du processus de calibration inverse avec les données expérimentales de **[Salvo 2014]** lot faible densité.

IV.4 Formalisme retenu - Synthèse

Le formalisme final retenu dans la suite des travaux est explicité (cf. Eq. IV.9) avec l'ensemble des valeurs numériques des différents coefficients définissant ce formalisme (cf. Eq. IV.9). Enfin une synthèse est faite sur le travail mené sur les polycristaux.

IV.4.1 Formalisme retenu

$$\dot{\gamma}_s^{\mathsf{vp}} = \dot{\gamma}_i^0 \left(\frac{|\tau_s|}{r_i}\right)^{n_i} sgn\left(\tau_s\right)$$

Avec :

r_i	$= \tau_i^0(T,\dot{\bar{\varepsilon}}) + h_i(T,\dot{\bar{\varepsilon}}) \times p_i$	
$\dot{p}_i$	$= \sum_{s\in S_i} \dot{\gamma}_s^{\mathsf{p}},\ \dot{\gamma}_s^{\mathsf{p}} = \lvert\dot{\gamma}_s^{\mathsf{vp}}\rvert$	
i	l'ensemble des familles de glissement, $i \in \{\{100\},\{110\}\}$	
S_i	l'ensemble des systèmes de glissement appartenant à la famille i	
s	l'ensemble des systèmes de glissement	

$$\tau_i^0(T,\dot{\bar{\varepsilon}}) = A_i(\dot{\bar{\varepsilon}})\ exp\left(-b_i\ T\right)$$
$$A_i(\dot{\bar{\varepsilon}}) = a_i^0\ log_{10}(\dot{\bar{\varepsilon}}) + a_i^1 \qquad \text{(IV.9)}$$

Numériquement :

$a^0_{\{100\}}$	$= 19.49711133$		$a^0_{\{110\}}$	$= 77.18803512$	$[MPa]$
$a^1_{\{100\}}$	$= 202.42143199$		$a^1_{\{110\}}$	$= 601.46741726$	$[MPa]$
$b_{\{100\}}$	$= 1.21548301\ 10^{-3}$		$b_{\{110\}}$	$= 1.32047924\ 10^{-3}$	$[°C]^{-1}$

$$h(T,\dot{\bar{\varepsilon}}) = \frac{a^{\mathsf{h}} \times ln\left(b^{\mathsf{h}} \times \dot{\bar{\varepsilon}} + f^{\mathsf{h}}\right)}{\left(c^{\mathsf{h}} \times T + d^{\mathsf{h}}\right)^{e^{\mathsf{h}}}}$$

Numériquement :

a^{h}	$= 1.01600268\ 10^5$	$[MPa]$	d^{h}	$= 1.21527632\ 10^{-1}$	$[-]$
b^{h}	$= 3.76964964\ 10^5$	$[s]^{-1}$	e^{h}	$= 5.$	$[-]$
c^{h}	$= 4.99210510\ 10^{-3}$	$[°C]^{-1}$	f^{h}	$= 2.58830822\ 10^2$	$[-]$

IV.4.2 Synthèse du chapitre IV

Le remontage d'échelle entre monocristal et polycristal n'est pas concluant avec les données traitées dans le chapitre III (essais sur des monocristaux). Plusieurs explications peuvent être avancés. Il est à retenir :

- ♢ Les caractéristiques des essais expérimentaux menés sur monocristaux sont trop loin des gammes de sollicitations rencontrées lors d'un RIA. La dépendance à la température, à la vitesse de déformation, à la porosité ainsi qu'à la stoechiométrie (pour ne citer que ces paramètres) ne sont pas bien pris en compte.
- ♢ Si à l'avenir et à partir de nouvelles campagnes d'essais sur monocristaux, il n'est toujours pas possible de faire un remontage d'échelle, il faudra s'interroger sur :
  - ▶ Le mécanisme induisant la déformation visco-plastique à l'intérieur des grains.
  - ▶ L'influence des joints de grains sur la réponse mécanique. Il pourrait être nécessaire de définir une certaine zone, proche des frontières des grains, avec un comportement spécifique.

Devant l'écart important suite à une application directe de la loi monocristalline (loi identifiée dans le chapitre III à partir d'essais réalisés sur des monocristaux) dans chaque grain du polycristal, il est apparu nécessaire de changer d'approche et d'effectuer une identification inverse de la loi locale basée sur des essais menés à l'échelle polycristalline. Cette identification se base sur les résultats de deux études, [**Salvo 2014**] d'un côté et [**Ben Saada 2017**] d'un autre côté. La dépendance du comportement mécanique aux paramètres de sollicitations que sont la température et la vitesse de déformation macroscopique n'est pas la même pour ces deux auteurs. Il est également difficile d'identifier de manière efficace, c'est-à-dire en introduisant des critères de convergences, une loi locale complexe vis-à-vis de ces deux paramètres de sollicitation. Pour ces raisons, le formalisme adopté pour la loi d'évolution est simplifié en s'inspirant des travaux de [**Knezevic et al. 2013**].

Le but visé est de retrouver le comportement asymptotique obtenu expérimentalement. De ce fait, la loi locale est prise élasto visco plastique avec écrouissage isotrope.

Le processus d'identifiation inverse se décline en deux étapes :

♢ Étape 1 : Calibration via la définition de la contrainte de croisement du coefficients τ_i^0 de Eq. IV.9.

- ▶ La contrainte de croisement est la contrainte correspondant à la déformation pour laquelle la pente d'élasticité numérique et la pente d'écrouissage asymptotique (expérimental) se croisent.
- ▶ En remarquant qu'une infinité de couples $(\tau_{\{100\}}^0, \tau_{\{110\}}^0)$ donnent la même contrainte de croisement, une certaine correction sur les données précédemment utilisés de $\tau_{\{100\}}^0$ est faite pour poser l'expression de $\tau_{\{100\}}^0(T, \dot{\bar{\varepsilon}})$ et déduire ses coefficients constitutifs en s'appuyant sur l'algorithme de [**Levenberg 1944 ; Marquardt 1963**].
- ▶ Finalement un processus itératif est utilisé pour chercher $\tau_{\{110\}}^0(T, \dot{\bar{\varepsilon}})$ qui donne la contrainte de croisement relevée expérimentalement aux conditions de sollicitation données. Par suite, une expression de $\tau_{\{110\}}^0(T, \dot{\bar{\varepsilon}})$ est posée. Enfin les coefficients constitutifs sont déduis en utilisant l'algorithme de [**Levenberg 1944 ; Marquardt 1963**].

♢ Étape 2 : Calibration via la définition de la pente d'écrouissage asymptotique du coefficients h_i de Eq. IV.9.

- ▶ Par manque de données le coefficient $h = h_i$ est pris égal sur les deux familles.
- ▶ Le coefficient $h(T, \dot{\bar{\varepsilon}})$ est cherché de manière itérative de sorte à garantir que la pente d'écrouissage obtenue numériquement corresponde à celle relevée expérimentalement.
- ▶ Finalement, en sélectionnant certaines données pour éviter des conflits entre auteurs, une certaine expression de la fonction $h(T, \dot{\bar{\varepsilon}})$ est posée. Les coefficients constitutifs de cette fonction sont déduit en utilisant l'algorithme de [**Levenberg 1944 ; Marquardt 1963**].

Les simulations numériques en champ complet sur un VER polycristallin appelant dans chaque grain la loi locale identifiée de manière inverse sont en bon accord avec les résultats expérimentaux de [**Ben Saada 2017**] (cf. Fig. IV.8) et en relativement bon accord avec les résultats expérimentaux de [**Salvo 2014**] lot faible densité (cf. Fig. IV.9). En particulier les dépendances à la température et à la vitesse de déformation macroscopique pour la gamme de sollicitations étudiée sont bien retrouvées. Il est possible de concilier les domaines de [**Ben Saada 2017**] et [**Salvo 2014**], domaines qui présentent des comportements relativement différents.

En conclusion, à l'issue de ces deux chapitres, une loi de comportement (cf. Eq. IV.9) permet de rendre compte des résultats expérimentaux effectifs obtenus dans les travaux de [**Salvo 2014 ; Ben Saada 2017**] balayant une large gamme de vitesses de déformation et de températures. Ce formalisme et l'identification associée sont, dans la suite des travaux, pris comme référence pour développer un modèle d'ordre réduit basé sur l'approche NTFA.

Troisième partie

Application de la méthode de réduction de modèle Nonuniform Transformation Field Analysis (NTFA) au comportement polycristallin de l'UO_2 en condition accidentelle de type RIA. Comparaison de l'approche en champ complet (FFT), prise comme référence, avec le modèle d'ordre réduit NTFA et les données expérimentales disponibles

Dans un premier temps, le cadre et le formalisme adoptés sont présentés. En particulier, le cadre des matériaux standard généralisés et les résultats théoriques associés pouvant concerner le problème traité sont rappelés succinctement. Puis, le cadre et le formalisme du problème considéré sont posés. Le formalisme est utilisé dans l'ensemble du chapitre.

Dans un deuxième temps, la Nonuniform Transformation Field Analysis (NTFA) est appliqué au problème considéré. Concrètement, les différentes étapes vues en bibliographie sont balayées. Cela passe de la décomposition des variables internes à la construction des modes, au calcul des différents tenseurs intervenant dans la loi de comportement, ainsi qu'aux différentes approximations des potentiels de force, approximations permettant d'aboutir aux lois d'évolution des variables internes réduites pour enfin finir par l'implémentation numérique.

Dans un troisième et dernier temps, les travaux concernant la prise en compte des paramètres de sollicitation, à savoir température et vitesse de déformation $(T, \dot{\bar{\varepsilon}})$, sont explicités. Ces travaux sont nécessaires afin de garder un nombre réduit de variables internes dans le modèle NTFA dans l'objectif d'avoir un temps de simulation aussi faible que possible.

Chapitre V

Application de la méthode d'ordre réduit NTFA à un comportement élasto viscoplastique écrouissable avec développement à l'ordre deux

V.1 Cadre des Matériaux Standard Généralisés (MSG) : cadre et formalisme du problème considéré

Dans cette section, le cadre des matériaux standard généralisés et les résultats théoriques associés pouvant concerner le problème traité sont rappelés succinctement. Les résultats étant exacts, ceci permet de faire un lien avec l'étape 3 et de voir où se situe les différentes approximations faites sur le potentiel de force homogénéisé si ce cadre est respecté. Enfin le cadre et le formalisme du problème considéré sont posés. Le formalisme est utilisé dans l'ensemble du chapitre.

V.1.1 Cadre des Matériaux Standard Généralisés (MSG) et résultats théoriques associés

Le cadre des matériaux standard généralisés est particularisé à un comportement élasto viscoplastique avec écrouissage. Les relations locales d'intérêt sont présentées Eq. V.1.

Tout d'abord, la liste des différentes variables internes et observables est dressée. De cette liste, il est possible d'exprimer l'énergie libre, fonction des variables d'état (internes et observables). Cette énergie doit être une fonction convexe. Ceci est notamment vrai pour la partie élasto viscoplastique. Il est alors nécessaire de supposer $w^{\mathsf{iso}}(p)$ positive et convexe (cf. Eq. V.1).

L'énergie libre étant définie, il est possible, au travers des relations constitutives, d'exprimer les différentes forces thermodynamiques associées à leur variable interne ou observable respectives. Le problème mécanique est posé.

Afin de compléter ce problème mécanique, il est nécessaire d'exprimer les équations d'évolution des différentes variables internes. Ces équations d'évolution découlent de l'existence d'un unique potentiel de force ou de dissipation (le potentiel de dissipation est le conjugué du potentiel de force et vice-versa) vérifiant certaines conditions. Entre autre, le potentiel de force doit vérifier Eq. V.2 pour s'inscrire dans le cadre des matériaux standard généralisés. De ces potentiels, il est alors possible d'exprimer les équations d'évolution par l'intermédiaire des différentes relations existantes.

$$
\begin{aligned}
&\text{Variables internes locales :} \left| \begin{array}{ll} \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}(\boldsymbol{x}) & \text{Déformation viscoplastique,} \\ p(\boldsymbol{x}) & \text{variable d'écrouissage.} \end{array} \right. \\
&\text{Variable observable :} \left| \begin{array}{ll} \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{x}) & \text{Déformation totale.} \end{array} \right.
\end{aligned}
$$

$$
w\left(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}, p\right) = \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}\right) : \boldsymbol{L} : \left(\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}\right) + w^{\mathsf{iso}}(p)
$$

$$
\text{Avec :} \left| \begin{array}{ll} w & \text{Énergie libre fonction des variables internes et de} \\ & \text{la déformation totale } \boldsymbol{\varepsilon}, \\ w^{\mathsf{iso}} & \text{énergie reprenant la contribution de l'écrouissage.} \end{array} \right.
$$

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial w}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} &= \boldsymbol{\sigma} \quad \left(\equiv \boldsymbol{L} : \left(\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}\right)\right) \\
-\frac{\partial w}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}} &= \boldsymbol{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp}} \quad \left(\equiv \boldsymbol{L} : \left(\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}\right)\right) \\
-\frac{\partial w}{\partial p} &= \mathcal{A}_{\mathsf{p}} \quad \left(\equiv -\frac{\partial w^{\mathsf{iso}}}{\partial p}\right)
\end{aligned}
\tag{V.1}
$$

$$
\text{Avec :} \left| \begin{array}{ll} \mathcal{A}_{\mathsf{p}} & \text{Force thermodynamique associée à la} \\ & \text{variable interne d'écrouissage : } p, \\ & \text{au choix de l'utilisateur,} \\ \boldsymbol{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp}} & \text{force thermodynamique associée à la} \\ & \text{variable interne viscoplastique } \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}. \end{array} \right.
$$

$$
\begin{aligned}
\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathsf{vp}}(\boldsymbol{x}, t) &= \frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp}}}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{x}, t)) \\
\dot{p}(\boldsymbol{x}, t) &= \frac{\partial \psi}{\partial \mathcal{A}_{\mathsf{p}}}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{x}, t))
\end{aligned}
$$

$$
\text{Avec :} \left| \begin{array}{ll} \psi(\boldsymbol{x}) & \text{Potentiel de force local.} \end{array} \right.
$$

$$
\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{x}, t) = \frac{\partial \varphi}{\partial \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathsf{vp}}}(\boldsymbol{x}, \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathsf{vp}}(\boldsymbol{x}, t))
$$

$$
\text{Avec :} \left| \begin{array}{ll} \varphi(\boldsymbol{x}) & \text{Potentiel de dissipation local.} \\ \varphi^* = \psi & (* \equiv \text{ Conjugué}) \end{array} \right.
$$

Dans la pratique, les équations d'évolution sont exprimées puis le potentiel de force est déduit. Les différentes conditions de Eq. V.2 sont ensuite vérifiées.

Le potentiel de force ψ doit vérifier les 3 conditions :

$(\mathcal{H}_0)$ ψ est convexe.

$(\mathcal{H}_1)$ ψ est positive sur son ensemble de définition.

$(\mathcal{H}_2)$ $\psi(0) = 0$. (V.2)

Dans l'idéal où les relations définies Eq. V.1 et les conditions définies Eq. V.2 sont respectées, le problème mécanique s'inscrit dans le cadre des matériaux standard généralisés. Ce cadre, bien que restrictif, permet de garantir certaines relations au niveau effectif. Les relations d'intérêt pour le problème considéré sont regroupées Eq. V.3.

Définition du comportement homogénéisé si Eq. V.1 et Eq. V.2 sont respectées :

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{\partial W^{\mathsf{hom}}}{\partial \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}}(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}, \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}(\boldsymbol{x}), p(\boldsymbol{x}))$$

$$\text{Avec :} \left| \begin{array}{ll} W^{\mathsf{hom}} & = \underset{\substack{<\varepsilon>=\bar{\varepsilon} \\ \varepsilon\#}}{Inf} < w(\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{x}), \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}(\boldsymbol{x}), p(\boldsymbol{x})) > \\ w(\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{x}), \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}(\boldsymbol{x}), p(\boldsymbol{x})) & = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}) : \boldsymbol{L} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}) + w^{\mathsf{iso}}(p) \end{array} \right.$$

Définition des potentiels homogénéisés si Eq. V.1 et Eq. V.2 sont respectées :

$$\psi^{\mathsf{hom}}(\bar{\boldsymbol{\sigma}}, t) = \underset{\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathsf{vp}}(\boldsymbol{x},t)}{Sup} < \sigma(\boldsymbol{x}, t) : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathsf{vp}}(\boldsymbol{x}, t) - \varphi(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathsf{vp}}(\boldsymbol{x}, t)) >$$

$$\text{Avec :} \left| \begin{array}{ll} \psi^{\mathsf{hom}} & \text{Potentiel de force homogénéisé} \end{array} \right.$$

$$\varphi^{\mathsf{hom}}(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathsf{vp}}(\boldsymbol{x}, t)) =< \varphi(\boldsymbol{x}, \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathsf{vp}}(\boldsymbol{x}, t)) >$$

$$\text{Avec :} \left| \begin{array}{ll} \varphi^{\mathsf{hom}} & \text{Potentiel de dissipation homogénéisé} \\ & \equiv \text{Moyenne du potentiel de dissipation local} \end{array} \right.$$

(V.3)

Ce cadre permet d'obtenir les expressions exactes du potentiel de force homogénéisé, du potentiel de dissipation ainsi que de l'énergie libre en fonction des potentiels locaux et de l'énergie libre locale. Enfin il permet également de faire le lien entre la contrainte effective ($\bar{\boldsymbol{\sigma}}$) et l'énergie libre effective.

V.1.2 Cadre et formalisme du problème considéré

Le problème considéré issu des travaux effectués sur polycristaux (cf. Eq. IV.9) est rappelé Eq. V.4. L'expression de la variable thermodynamique ($\mathcal{A}_{\mathsf{p}}$), force associée à la variable d'écrouissage, est posée. Il est à rappeler que c'est un choix. À ce titre, il est possible de prendre d'autres expressions pour cette force thermodynamique. Néanmoins cette expression permet d'aboutir à une énergie w^{iso} positive et convexe vis-à-vis de la variable d'écrouissage (cf. Eq. V.4).

$$\dot{\gamma}_s^{\mathsf{vp}} = \dot{\gamma}_i^0 \left(\frac{|\tau_s|}{r_i} \right)^{n_i} sgn\,(\tau_s)$$

$$\text{Avec :} \left| \begin{array}{ll} r_i & = \tau_i^0 + h_i\, p_i \\ \dot{p}_i & = \sum_{s \in S_i} \dot{\gamma}_s^{\mathsf{p}},\ \dot{\gamma}_s^{\mathsf{p}} = |\dot{\gamma}_s^{\mathsf{vp}}| \end{array} \right.$$

$$\textbf{Choix :} \left\| \begin{array}{ll} \mathcal{A}_{\mathsf{p},i} & = -r_i \\ w^{\mathsf{iso}}(p) & = \sum_i w_i^{\mathsf{iso}}(p_i) \\ w_i^{\mathsf{iso}}(p_i) & = \tau_i^0\, p_i + \frac{1}{2}\, h_i\, p_i^2 \end{array} \right.$$

(V.4)

Par suite et dans l'idée de se rapprocher du formalisme issu du cadre des matériaux standard généralisées, l'équation d'évolution des variables internes est explicitée Eq. V.5. En particulier, le système d'équations regroupe l'évolution des cisaillements propres à chacun des systèmes en fonction des deux variables thermodynamiques ($\mathcal{A}_{\mathsf{p}}$, $\boldsymbol{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp}}$), variables qui sont couplées. Les variables étant couplées, il est également nécessaire d'exprimer l'évolution de la variable d'écrouissage. Les expressions sont également simplifiées.

$$\dot{\gamma}_s^{\mathsf{vp}} = \dot{\gamma}_i^0 \left(\frac{|\mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}|}{-\mathcal{A}_{\mathsf{p},i}} \right)^{n_i} sgn\left(\mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}\right)$$

$$\text{Avec :} \left| \begin{array}{ll} \mathcal{A}_{\mathsf{p},i} & = -r_i \\ \mathcal{A}_{\mathsf{vp},s} & = \boldsymbol{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp}} : \boldsymbol{m_s} \end{array} \right.$$

$$\textbf{Et :} \left\| \begin{array}{ll} \dot{p}_i & = \sum\limits_{s \in S_i} |\dot{\gamma}_s^{\mathsf{vp}}| \\ & = \sum\limits_{s \in S_i} \dot{\gamma}_s^{\mathsf{p}} \left(\boldsymbol{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp}}, \mathcal{A}_{\mathsf{p},i} \right) \end{array} \right.$$

$$\dot{\gamma}_s^{\mathsf{p}} = \dot{\gamma}_i^0 \left(\frac{|\mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}|}{-\mathcal{A}_{\mathsf{p},i}} \right)^{n_i} \tag{V.5}$$

Finalement le problème mécanique considéré est le suivant Eq. V.6.

$$(\mathcal{P}) \left\{ \begin{array}{ll} div(\boldsymbol{\sigma}) = 0 & \text{dans V} \\ \boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{L} : \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{e}}(u),\ \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{e}}(u) = \boldsymbol{\varepsilon}(u) - \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}(u) & \text{dans V} \\ \boldsymbol{u} - \langle \boldsymbol{\varepsilon}(u) \rangle \cdot \boldsymbol{x} & \#\text{ sur } \partial V \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n} & \text{-}\#\text{ sur } \partial V \\ \langle \boldsymbol{\varepsilon}(u) \rangle = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} & \end{array} \right.$$

Où : | # désigne les conditions périodiques, | -# désigne les conditions antipériodiques.

Avec : $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}} = \sum\limits_s \gamma_s^{\mathsf{vp}} \boldsymbol{m_s}$

Et :

$\boldsymbol{\varepsilon}$	Tenseur des déformations totales.
$\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{e}}$	Tenseur des déformations élastiques.
$\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}$	Tenseur des déformations visco-plastiques.
$\boldsymbol{m_s} = \boldsymbol{b_s} \otimes \boldsymbol{n_s}$	Tenseur de Schmid du système s.
$\boldsymbol{n_s}$	Normale au plan de glissement du système s.
$\boldsymbol{b_s}$	Direction othogonale à la ligne de dislocation engendrant le plan de glissement du système s.
γ_s^{vp}	Glissement propre au système s.

De plus : $\mathcal{A}_{\mathsf{p},i} = -r_i$; $\mathcal{A}_{\mathsf{vp},s} = \boldsymbol{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp}} : \boldsymbol{m_s}$

En complément : $r_i = \tau_i^0 + h_i\, p_i$; $\dot{p}_i = \sum\limits_{s \in S_i} \dot{\gamma}_s^{\mathsf{p}} \left(\boldsymbol{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp}}, \mathcal{A}_{\mathsf{p},i} \right)$

$$\dot{\gamma}_s^{\mathsf{vp}} = \dot{\gamma}_i^0 \left(\frac{|\mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}|}{-\mathcal{A}_{\mathsf{p},i}} \right)^{n_i} sgn\left(\mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}\right)$$

$$\dot{\gamma}_s^{\mathsf{p}} = \dot{\gamma}_i^0 \left(\frac{|\mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}|}{-\mathcal{A}_{\mathsf{p},i}} \right)^{n_i} \tag{V.6}$$

Il reste à expliciter le potentiel de force duquel découle les équations d'évolution présentées Eq. V.6.

Malheureusement, dans ce problème mécanique Eq. V.6, il est nécessaire d'introduire deux potentiels de force afin d'obtenir les lois d'évolution. Chacun des deux potentiels est associé à la variable

interne lui correspondant. Entre autre, il est nécessaire d'introduire $\psi_{\mathsf{vp}}\left(\boldsymbol{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp}}, \mathcal{A}_{\mathsf{p}}\right)$ potentiel de force associé à la déformation visco-plastique et $\psi_{\mathsf{p}}\left(\boldsymbol{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp}}, \mathcal{A}_{\mathsf{p}}\right)$, potentiel de force associé à l'écrouissage.

Dans un premier système d'équations (cf. Eq. V.7), le potentiel de force visco-plastique ψ_{vp}, potentiel de force associé à la déformation visco-plastique est identifié et explicité analytiquement.

Dans un deuxième système d'équations (cf. Eq. V.8), il est montré que le potentiel de force ψ_{p}, potentiel de force associé à l'écrouissage, existe et est bien défini.

L'expression analytique des potentiels de force est étudiée, dans l'Annexe G, afin de statuer sur le respect ou non des hypothèses du cadre des matériaux standard généralisés.

Du fait de la nécessité de deux potentiels pour aboutir aux équations d'évolution des variables internes, le problème mécanique traité ne s'inscrit plus dans le cadre des matériaux standard généralisés. Les résultats macroscopiques établis dans ce cadre (cf. Eq. V.3) sont néanmoins repris dans la suite, en particulier lorsque certaines approximations sont faites sur le potentiel de force homogénéisé.

Il est à remarquer qu'en visco-plasticité pure, sans la prise en compte de l'écrouissage, le problème mécanique s'inscrit bien dans le cadre des matériaux standard généralisés. Il est donc possible, en restreignant le problème, de profiter des résultats macroscopiques établis.

Le potentiel de force ψ_{vp} associé à la déformation visco-plastique est défini tel que :

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathsf{vp}}(\boldsymbol{x}, t) = \frac{\partial \psi_{\mathsf{vp}}}{\partial \boldsymbol{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp}}}(\boldsymbol{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp}}, \mathcal{A}_{\mathsf{p},i})$$

$$\psi_{\mathsf{vp}}(\boldsymbol{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp}}, \mathcal{A}_{\mathsf{p},i}) = \sum_s \psi_{\mathsf{vp},s}(\boldsymbol{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp}}, \mathcal{A}_{\mathsf{p},i})$$

D'un côté : $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathsf{vp}} = \sum_s \dot{\gamma}_s^{\mathsf{vp}} \boldsymbol{m_s}$ d'après Eq. V.6

D'un autre :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi_{\mathsf{vp}}}{\partial \boldsymbol{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp}}} &= \sum_s \frac{\partial \psi_{\mathsf{vp},s}}{\partial \boldsymbol{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp}}} \\ &= \sum_s \frac{\partial \psi_{\mathsf{vp},s}}{\partial \mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}} \frac{\partial \mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}}{\partial \boldsymbol{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp}}} \\ &= \sum_s \frac{\partial \psi_{\mathsf{vp},s}}{\partial \mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}} \boldsymbol{m_s} \end{aligned} \tag{V.7}$$

Par identification : $\dot{\gamma}_s^{\mathsf{vp}}(\boldsymbol{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp}}, \mathcal{A}_{\mathsf{p},i}) = \frac{\partial \psi_{\mathsf{vp},s}}{\partial \mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}}(\boldsymbol{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp}}, \mathcal{A}_{\mathsf{p},i})$

Le travail portera sur $\psi_{\mathsf{vp},s}$ défini tel que $\psi_{\mathsf{vp},s}(\boldsymbol{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp}}, \mathcal{A}_{\mathsf{p},i}) = \int_0^{\mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}} \dot{\gamma}_s^{\mathsf{vp}}(u, \mathcal{A}_{\mathsf{p},i}) \mathrm{d}u$

$$\psi_{\mathsf{vp},s}(\boldsymbol{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp}}, \mathcal{A}_{\mathsf{p},i}) = \dot{\gamma}_i^0 \frac{(-\mathcal{A}_{\mathsf{p},i})}{n_i + 1} \left(\frac{|\mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}|}{-\mathcal{A}_{\mathsf{p},i}} \right)^{n_i+1}$$

Avec :

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{\mathsf{p},i} &= -r_i \\ r_i &= \tau_i^0 + h_i \, p_i \\ \mathcal{A}_{\mathsf{vp},s} &= \boldsymbol{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp}} : \boldsymbol{m_s} \end{aligned}$$

Le potentiel de force ψ_{p} associé à la variable d'écrouissage est défini tel que :

$$\psi_{\mathsf{p}}(\boldsymbol{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp}}, \mathcal{A}_{\mathsf{p},i}) = \sum_s \psi_{\mathsf{p},s}(\boldsymbol{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp}}, \mathcal{A}_{\mathsf{p},i})$$

$$\dot{\gamma}^{\mathsf{p}}_s(\boldsymbol{x}, t) = \frac{\partial \psi_{\mathsf{p},s}}{\partial \mathcal{A}_{\mathsf{p},i}} (\mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}, \mathcal{A}_{\mathsf{p},i})$$

Le travail portera sur $\psi_{\mathsf{p},s}$ défini tel que $\psi_{\mathsf{p},s}(\boldsymbol{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp}}, \mathcal{A}_{\mathsf{p},i}) = \int_0^{\mathcal{A}_{\mathsf{p},i}} \dot{\gamma}^{\mathsf{p}}_s(\boldsymbol{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp}}, u)\mathrm{du}$ (V.8)

$$\psi_{\mathsf{p},s}(\boldsymbol{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp}}, \mathcal{A}_{\mathsf{p},i}) = \dot{\gamma}^0_i \frac{|\mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}|}{(n_i - 1)} \left(\frac{|\mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}|}{-\mathcal{A}_{\mathsf{p},i}} \right)^{n_i - 1}$$

$$\text{Avec :} \left| \begin{array}{ll} \mathcal{A}_{\mathsf{p},i} & = -r_i \\ r_i & = \tau^0_i + h_i\, p_i \\ \mathcal{A}_{\mathsf{vp},s} & = \mathcal{A}_{\mathsf{vp}} : \boldsymbol{m_s} \end{array} \right.$$

V.2 Application de la NTFA au problème considéré

Cette section a pour but d'appliquer la méthode de réduction de modèle Nonuniform Transformation Field Analysis (NTFA) au problème mécanique d'intérêt. L'application de cette méthode est décomposée en quatre étapes.

La première étape consiste à expliciter la décomposition des variables internes. En plus de la décomposition classique de la déformation visco-plastique, la variable d'écrouissage est décomposée de deux manières différentes dans l'idée de rendre compte de l'impact de l'approximation de cette variable tant dans les équations que sur les résultats numériques issus du modèle d'ordre réduit.

La deuxième étape se concentre sur le calcul des tenseurs d'intérêt, tenseurs nécessaires à la résolution numérique du problème mécanique. En particulier les tenseurs d'influence et de localisation sont calculés.

La troisième étape permet de poser l'expression puis l'évolution des nouvelles variables internes réduites en s'appuyant notamment sur l'énergie libre homogénéisée et au travers de plusieurs approximations successives sur les potentiels de force homogénéisés.

Enfin la quatrième et dernière étape concerne l'implémentation numérique. Les résultats établis aux étapes précédentes sont condensés et l'algorithme de résolution est explicité.

V.2.1 Étape 1 : Décompositions envisagées

La décomposition des deux variables internes, à savoir le tenseur de déformation visco-plastique et la variable d'écrouissage est explicitée Eq. V.9. Cette décomposition permet de scinder la partie temporelle et spatiale des variables internes considérées. En d'autres termes, les variables internes ne sont plus que des combinaisons affines de certains champs (scalaire ou tensoriel suivant la variable considérée) appelés modes qui ne dépendent pas du temps. Seules les combinaisons, portées par les nouvelles variables internes réduites, sont fonction du temps.

Concernant le tenseur des déformations visco-plastiques, la décomposition classique dans ce modèle est reprise de la littérature (cf. [**Michel et Suquet 2016b**] entre autres). Elle consiste à décomposer cette variable sur un certain nombre de modes.

Pour ce qui est de la variable d'écrouissage, deux décompositions sont envisagées. La première est reprise de la littérature ([**Michel et Suquet 2016b**]) et consiste à considérer l'écrouissage uniforme par grain. La deuxième façon, largement inspirée de la littérature et en particulier de la décomposition faite sur le tenseur des déformations visco-plastiques, consiste à décomposer cette variable sur des modes.

L'idée de ces deux décompositions s'inspire des différences constatées dans les simulations numériques lorsque le tenseur des déformations visco-plastiques est pris uniforme par phase ou bien décomposé. En particulier la précision et le temps de simulation est largement en faveur d'une décomposition sur cette variable. À ce titre, le but visé est de voir l'impact de la manière de décomposer la variable d'écrouissage sur les résultats issus des simulations numériques ainsi que la différence de temps de simulation.

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}(\boldsymbol{x},t) = \sum_k \xi_{\mathsf{vp}}^{(k)}(t)\ \boldsymbol{\mu}_{\mathsf{vp}}^{(\boldsymbol{k})}(\boldsymbol{x})$$

Avec :	$\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}(\boldsymbol{x},t)$	Déformation visco-plastique.
	$\xi_{\mathsf{vp}}^{(k)}$	Nouvelles variables internes réduites.
	$\boldsymbol{\mu}_{\mathsf{vp}}^{(\boldsymbol{k})}$	Ensemble des modes associés aux variables internes correspondantes (tenseur).
	M_{vp}	Nombre de modes $\boldsymbol{\mu}_{\mathsf{vp}}^{(\boldsymbol{k})}$.

Écrouissage décomposé à la manière de la déformation visco-plastique :

$$p_i(\boldsymbol{x},t) = \sum_k \xi_{\mathsf{p},i}^{(k)}(t)\ \mu_{\mathsf{p},i}^{(k)}(\boldsymbol{x})$$

Avec :	$p_i(\boldsymbol{x},t)$	Écrouissage isotrope.
	$\xi_{\mathsf{p},i}^{(k)}$	Nouvelles variables internes réduites.
	$\mu_{\mathsf{p},i}^{(k)}$	Ensemble des modes associés aux variables internes correspondantes (scalaire).
	$M_{\mathsf{p},i}$	Nombre de modes $\mu_{\mathsf{p},i}^{(k)}$.

(V.9)

Écrouissage pris uniforme par grain :

$$p_i(\boldsymbol{x},t) = \sum_g \xi_{\mathsf{p},i}^{(g)}(t)\ \chi^{(g)}(\boldsymbol{x})$$

Avec :	$p(\boldsymbol{x},t)$	Écrouissage isotrope.
	$\xi_{\mathsf{p},i}^{(g)}$	Nouvelles variables internes réduites.
	$\chi^{(g)}(\boldsymbol{x})$	$= \begin{cases} 1 & \text{Si } \boldsymbol{x} \in (g) \\ 0 & \text{Sinon.} \end{cases}$
	(g)	Grain.

La discussion de la construction effective des modes est faite plus tard dans le document (cf. VI.1 Construction des modes).

V.2.2 Étape 2 : Définition et calcul des tenseurs de localisation et d'influence

Sans s'appuyer sur la décomposition du tenseur des déformations visco-plastiques, il est possible d'exhiber le tenseur des déformations totales solution du problème mécanique posé (à variables internes figées). Cette solution s'appuie sur le théorème de superposition et la résolution de deux problèmes mécaniques « élémentaires ». Le premier consiste à résoudre un problème purement élastique, lorsque le tenseur des déformations visco-plastiques est pris nul (cf. Eq. V.10). Le deuxième consiste à résoudre un problème où la moyenne du tenseur des déformations est prise nulle et lorsqu'une pré-déformation visco-plastique est imposée (cf. Eq. V.10 en considérant $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}(\boldsymbol{x},t)$ comme une pré-déformation). Ceci est relativement couteux en temps de calcul car il est nécessaire de calculer

à chaque pas de temps l'opérateur non local $\boldsymbol{D} * \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}(\boldsymbol{x}, t)$ qui est une opération et une intégrale sur l'ensemble du VER considéré. C'est entre autre le calcul qui est effectué pour obtenir la solution en champ complet (méthode FFT par exemple).

La décomposition effectuée sur le tenseur des déformations visco-plastiques (cf. Eq. V.9) assure la séparation entre la variable spatiale $\boldsymbol{x}$ et la variable temporelle t. De ce fait, le problème à pré-déformation (cf. Eq. V.10 en considérant $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}(\boldsymbol{x}, t)$ comme une pré-déformation) se transforme en M_{vp} problèmes élémentaires (cf. Eq. V.10), avec M_{vp} le nombre de modes visco-plastiques retenus. Les pré-déformations sont les modes visco-plastiques sur lesquels est décomposée le tenseur des déformations visco-plastiques. Ainsi, le calcul problématique de $\boldsymbol{D} * \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}(\boldsymbol{x}, t)$ n'a plu qu'à être fait une et une seule fois en calculant pour l'ensemble des modes retenus $\boldsymbol{D} * \boldsymbol{\mu}_{\mathsf{vp}}^{(l)}(\boldsymbol{x})$.

Il est alors possible d'exprimer le tenseur des déformations totales solution du problème (cf. Eq. V.11) en fonction des variables d'état du système. Pour autant, le problème réduit d'évolution ne peut pas encore être résolu. Il reste à expliciter l'évolution des nouvelles variables internes réduites spécifiques à la partie visco-plastique $\xi_{\mathsf{vp}}^{(l)}(t)$, variables réduites couplées à l'évolution des variables internes réduites spécifiques à l'écrouissage $\xi_{\mathsf{p},i}^{(l)}(t)$. Ce point est l'objet de l'étape 3.

Problème élastique : $\left\| \; \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0} \right.$

$$(\mathcal{P}) \begin{cases} div(\boldsymbol{\sigma}) = 0 & \text{dans } V \\ \boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{L} : \boldsymbol{\varepsilon}(u) & \text{dans } V \\ \boldsymbol{u} - \langle \boldsymbol{\varepsilon}(u) \rangle \cdot \boldsymbol{x} & \#\text{ sur } \partial V \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n} & \text{-}\#\text{ sur } \partial V \\ \langle \boldsymbol{\varepsilon}(u) \rangle = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \end{cases}$$

Problème avec pré-déformation imposée et moyenne nulle : $\left\| \begin{array}{ll} \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}(\boldsymbol{x}) & = \boldsymbol{\mu}_{\mathsf{vp}}^{(k)}(\boldsymbol{x}) \\ \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} & = \boldsymbol{0} \end{array} \right.$

$$(\mathcal{P}) \begin{cases} div(\boldsymbol{\sigma}) = 0 & \text{dans } V \\ \boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{L} : \left(\boldsymbol{\varepsilon}(u) - \boldsymbol{\mu}_{\mathsf{vp}}^{(k)} \right) & \text{dans } V \\ \boldsymbol{u} - \langle \boldsymbol{\varepsilon}(u) \rangle \cdot \boldsymbol{x} & \#\text{ sur } \partial V \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n} & \text{-}\#\text{ sur } \partial V \\ \langle \boldsymbol{\varepsilon}(u) \rangle = \boldsymbol{0} \end{cases}$$

(V.10)

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{x}, t) = \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}) : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(t) + \sum_{l}^{M_{\mathsf{vp}}} \boldsymbol{D} * \boldsymbol{\mu}_{\mathsf{vp}}^{(l)}(\boldsymbol{x}) \, \xi_{\mathsf{vp}}^{(l)}(t)$$

Avec :

$\boldsymbol{\varepsilon}$	Tenseur des déformations totales.
$\boldsymbol{A}$	Tenseur de localisation solution de Eq. V.10.
$\boldsymbol{D} * \boldsymbol{\mu}_{\mathsf{vp}}^{(l)}$	Tenseur d'influence solution de Eq. V.10.
$\boldsymbol{\mu}_{\mathsf{vp}}^{(l)}$	Mode issu de la décomposition (cf. Eq. V.9).

(V.11)

$$\boldsymbol{D} * \boldsymbol{\mu}_{\mathsf{vp}}^{(l)}(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{|V|} \int_{V} \boldsymbol{D}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x'}) : \boldsymbol{\mu}_{\mathsf{vp}}^{(l)}(\boldsymbol{x'}) \, \mathrm{d}\boldsymbol{x'}$$

Avec :

$\boldsymbol{D}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x'}) = \boldsymbol{\Gamma}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x'}) : \boldsymbol{L}(\boldsymbol{x'})$	Opérateur non local.
$\boldsymbol{\Gamma}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x'})$	Opérateur non local de Green.

V.2.3 Étape 3 : Approximation des potentiels de force homogénéisés permettant d'établir les lois d'évolution des nouvelles variables réduites

Le travail suivant s'appuie largement sur l'article de [**Michel et Suquet 2016b**]. Afin de compléter le problème mécanique, il reste à définir les équations d'évolution des nouvelles variables internes réduites (ξ_{vp}, $\xi_{\mathsf{p},i}$ c'est à dire l'expression de $\dot{\xi}_{\mathsf{vp}}$, $\dot{\xi}_{\mathsf{p},i}$) ou les équations d'évolution des forces thermodynamiques réduites (a_{vp}, $a_{\mathsf{p},i}$ c'est à dire l'expression de $\dot{a}_{\mathsf{vp}}$, $\dot{a}_{\mathsf{p},i}$). Il est préférable et le choix a été fait d'exprimer l'évolution des forces thermodynamiques réduites (a_{vp}, $a_{\mathsf{p},i}$ c'est à dire l'expression de $\dot{a}_{\mathsf{vp}}$, $\dot{a}_{\mathsf{p},i}$).

L'idée ici est d'expliciter dans un premier temps l'expression des forces thermodynamiques réduites (a_{vp}, $a_{\mathsf{p},i}$) associées aux nouvelles variables internes réduites (ξ_{vp}, $\xi_{\mathsf{p},i}$) puis dans un deuxième temps de préciser les équations d'évolution de ces forces réduites.

Il est nécessaire d'expliciter l'énergie libre homogénéisée afin de pouvoir déduire l'expression des forces thermodynamiques réduites. Il est supposé que l'énergie libre homogénéisée est la moyenne sur l'ensemble du Volume Élémentaire Représentatif considéré de l'énergie libre locale. Cette énergie libre homogénéisée (cf. Eq. V.12) permet d'aboutir aux expressions des nouvelles variables thermodynamiques réduites ($\boldsymbol{a}_{\mathsf{vp}}$, $a_{\mathsf{p},i}$) en s'appuyant sur les relations constitutives. Les expressions analytiques de ces variables sont précisées Eq. V.12. Ces expressions analytiques sont fonction de la décomposition effectuée (cf. Eq. V.9).

$$w\left(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}, p\right) = \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}\right) : \boldsymbol{L} : \left(\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}\right) + w^{\mathsf{iso}}(p)$$

Avec : w Énergie libre fonction des variables d'état, w^{iso} énergie reprenant la contribution de l'écrouissage.

$$w^{\mathsf{hom}} = < w\left(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}, p\right) >$$

Avec : w^{hom} Énergie libre homogénéisée.

Forces thermodynamiques $a_{\mathsf{vp}}^{(k)}$ associées aux $\xi_{\mathsf{vp}}^{(k)}$

$$a_{\mathsf{vp}}^{(k)} : \left\| \begin{array}{ll} a_{\mathsf{vp}}^{(k)} & = -\dfrac{\partial w^{\mathsf{hom}}}{\partial \xi_{\mathsf{vp}}^{(k)}} \\ & = - < \dfrac{\partial w}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}} : \dfrac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}}{\partial \xi_{\mathsf{vp}}^{(k)}} > \\ & = < \boldsymbol{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp}} : \boldsymbol{\mu}_{\mathsf{vp}}^{(\boldsymbol{k})} > \\ & = \boldsymbol{a}^{(\boldsymbol{k})} : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \sum_{l} < \boldsymbol{\mu}_{\mathsf{vp}}^{(\boldsymbol{k})} : \boldsymbol{\rho}_{\mathsf{vp}}^{(\boldsymbol{l})} > \xi_{\mathsf{vp}}^{(l)} \end{array} \right.$$

Avec :

$$\left| \begin{array}{ll} \boldsymbol{a}^{(\boldsymbol{k})} & =< \boldsymbol{\mu}_{\mathsf{vp}}^{(\boldsymbol{k})} : \boldsymbol{L} : \boldsymbol{A} > \\ \boldsymbol{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp}} & = \boldsymbol{L} : \boldsymbol{A} : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \sum_{k} \boldsymbol{\rho}_{\mathsf{vp}}^{(\boldsymbol{k})}\, \xi_{\mathsf{vp}}^{(k)} \\ \boldsymbol{\rho}_{\mathsf{vp}}^{(\boldsymbol{k})} & = \boldsymbol{L} : (\boldsymbol{D} * \boldsymbol{\mu}_{\mathsf{vp}}^{(\boldsymbol{k})} - \boldsymbol{\mu}_{\mathsf{vp}}^{(\boldsymbol{k})}) \end{array} \right. \tag{V.12}$$

Forces thermodynamiques $a_{\mathsf{p},i}^{(k)}$ associées aux $\xi_{\mathsf{p},i}^{(k)}$ **[Décomposé]**

$$a_{\mathsf{p},i}^{(k)} : \left\| \begin{array}{ll} a_{\mathsf{p},i}^{(k)} & = -\dfrac{\partial w^{\mathsf{hom}}}{\partial \xi_{\mathsf{p},i}^{(k)}} \\ & = - < \dfrac{\partial w^{\mathsf{iso}}}{\partial p} \dfrac{\partial p_i}{\partial \xi_{\mathsf{p},i}^{(k)}} > \\ & = < \mathcal{A}_{\mathsf{p},i}\, \mu_{\mathsf{p},i}^{(k)} > \\ & = -\tau_i^0 \ < \mu_{\mathsf{p},i}^{(k)} > - h_i \sum_{l} < \mu_{\mathsf{p},i}^{(k)} \mu_{\mathsf{p},i}^{(l)} > \xi_{\mathsf{p},i}^{(l)} \end{array} \right.$$

Avec :

$$\left| \begin{array}{ll} \mathcal{A}_{\mathsf{p},i} & = -r_i \\ r_i & = \tau_i^0 + h_i\, p_i \end{array} \right.$$

Forces thermodynamiques $a_{\mathsf{p},i}^{(g)}$ associées aux $\xi_{\mathsf{p},i}^{(g)}$ **[Uniforme par grain]**

$$a_{\mathsf{p},i}^{(g)} : \left\| \begin{array}{ll} a_{\mathsf{p},i}^{(g)} & = < \mathcal{A}_{\mathsf{p},i}\, \chi^{(g)} > \\ & = -\tau_i^0\, c^{(g)} - h_i\, \xi_{\mathsf{p},i}^{(k)}\, c^{(g)} \end{array} \right.$$

Avec : $c^{(g)} = \dfrac{|V^{(g)}|}{|V|}$, $|V^{(g)}|$ le volume occupé par le grain (g).

Les expressions des forces thermodynamiques réduites étant obtenues, il est possible d'expliciter l'évolution de ces variables via les équations Eq. V.13. Ces équations relient l'évolution des forces thermodynamiques réduites au potentiel de force homogénéisé. Pour rappel, le problème mécanique ne s'inscrit pas dans le cadre des matériaux standard généralisées. Ceci constitue une première hypothèse de travail.

Évolution des forces thermodynamiques $a_{\mathsf{vp}}^{(k)}$

$$a_{\mathsf{vp}}^{(k)} = \boldsymbol{a^{(k)}} : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \sum_l < \boldsymbol{\mu}_{\mathsf{vp}}^{\boldsymbol{(k)}} : \boldsymbol{\rho}_{\mathsf{vp}}^{\boldsymbol{(l)}} > \xi_{\mathsf{vp}}^{(l)}$$

$$\text{Par dérivation :} \left| \quad \dot{a}_{\mathsf{vp}}^{(k)}(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}, \xi_{\mathsf{vp}}) = \frac{\partial a_{\mathsf{vp}}^{(k)}}{\partial \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}} : \dot{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}} + \sum_l \frac{\partial a_{\mathsf{vp}}^{(k)}}{\partial \xi_{\mathsf{vp}}^{(l)}} \dot{\xi}_{\mathsf{vp}}^{(l)} \right.$$

$$\text{Avec :} \left| \quad \dot{\xi}_{\mathsf{vp}}^{(l)} = \frac{\partial \psi_{\mathsf{vp}}^{\mathsf{hom}}}{\partial a_{\mathsf{vp}}^{(l)}} \right.$$

$$\dot{a}_{\mathsf{vp}}^{(k)} = \frac{\partial a_{\mathsf{vp}}^{(k)}}{\partial \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}} : \dot{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}} + \frac{\partial \psi_{\mathsf{vp}}^{\mathsf{hom}}}{\partial \xi_{\mathsf{vp}}^{(k)}}$$

Évolution des forces thermodynamiques $a_{\mathsf{p},i}^{(k)}$ [**Décomposé**]

$$a_{\mathsf{p},i}^{(k)} = -\boldsymbol{\tau}_i^0 < \mu_{\mathsf{p},i}^{(k)} > -h_i \sum_l < \mu_{\mathsf{p},i}^{(k)} \mu_{\mathsf{p},i}^{(l)} > \xi_{\mathsf{p},i}^{(l)}$$

$$\text{Par dérivation :} \left| \quad \dot{a}_{\mathsf{p},i}^{(k)}(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}, \xi_{\mathsf{p},i}) = \frac{\partial a_{\mathsf{p},i}^{(k)}}{\partial \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}} : \dot{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}} + \sum_l \frac{\partial a_{\mathsf{p},i}^{(k)}}{\partial \xi_{\mathsf{p},i}^{(l)}} \dot{\xi}_{\mathsf{p},i}^{(l)} \right.$$

$$\text{Avec :} \left| \quad \dot{\xi}_{\mathsf{p},i}^{(l)} = \frac{\partial \psi_{\mathsf{p},i}^{\mathsf{hom}}}{\partial a_{\mathsf{p},i}^{(l)}} \right.$$

$$\dot{a}_{\mathsf{p},i}^{(k)} = \frac{\partial \psi_{\mathsf{p},i}^{\mathsf{hom}}}{\partial \xi_{\mathsf{p},i}^{(k)}}$$

(V.13)

Évolution des forces thermodynamiques $a_{\mathsf{p},i}^{(g)}$ [**Uniforme par grain**]

$$a_{\mathsf{p},i}^{(g)} = -\boldsymbol{\tau}_i^0 \, c^{(g)} - h_i \, \xi_{\mathsf{p},i}^{(k)} \, c^{(g)}$$

$$\dot{a}_{\mathsf{p},i}^{(g)} = \frac{\partial \psi_{\mathsf{p},i}^{\mathsf{hom}}}{\partial \xi_{\mathsf{p},i}^{(g)}}$$

Afin de pouvoir expliciter l'évolution de ces forces réduites, il est maintenant nécessaire d'expliciter l'expression des potentiels de force. Une deuxième et forte approximation est de considérer que les potentiels de force homogénéisés sont la moyenne sur l'ensemble du volume considéré des potentiels de forces locaux (cf. Approx [1] Eq. V.14).

À ce stade et comme cela a été proposé par [**Fritzen et Leuschner 2013**], il est possible de s'arrêter à cette expression pour résoudre le problème mécanique réduit. Néanmoins, il est nécessaire à chaque pas de temps de calculer ces potentiels de force homogénéisés qui sont une moyenne sur l'ensemble du volume. En d'autres termes, évaluer ces expressions est très coûteux en temps de simulation. Dans l'idée de réduire drastiquement ce temps de simulation une troisième approximation est faite. Celle-ci consiste à développer les potentiels de force homogénéisés autour d'un point dit de fonctionnement, ici le point de fonctionnement retenu est la moyenne des variables considérées (cf. Approx [2] Eq. V.14). Ce développement pouvant s'apparenter à un développement de Taylor à l'ordre 2 et appelé TSO pour Tangent Second Order, proposé dans [**Michel et Suquet 2016b**] (voir aussi [**Castañeda 1996**] qui est à l'origine de la linéarisation du potentiel), permet de s'affranchir du calcul des potentiels de force homogénéisés à chaque pas de temps.

Si le problème est dans le cadre des matériaux standard généralisés :

Approx [**1**] : $\psi^{\mathsf{hom}} = \bar{\psi}$

$$\text{Avec :} \left\| \begin{array}{ll} \psi(X,Y) & = \sum_s \psi_s(X,Y) \\ \bar{\psi} & = <\psi(X,Y)> \\ & = \sum_g c^{(g)} \sum_s <\psi_s(X,Y)>^{(g)} \end{array} \right.$$

Approx [**2**] : $\psi_s(X,Y)$ Développé à l'ordre 2 autour de la moyenne.

$$\psi_s^{\mathsf{TSO}}(X,Y) = \psi_s(\bar{X}^{(g)},\bar{Y}^{(g)}) + \frac{\partial \psi_s}{\partial X}\,(X^{(g)}-\bar{X}^{(g)}) + \frac{\partial \psi_s}{\partial Y}\,(Y^{(g)}-\bar{Y}^{(g)})$$
$$\left| \begin{array}{l} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 \psi_s}{\partial X^2}\,(X^{(g)}-\bar{X}^{(g)})^2 + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 \psi_s}{\partial Y^2}\,(Y^{(g)}-\bar{Y}^{(g)})^2 \\ + \frac{\partial^2 \psi_s}{\partial X \partial Y}(\bar{X}^{(g)},\bar{Y}^{(g)})\,(X^{(g)}-\bar{X}^{(g)})(Y^{(g)}-\bar{Y}^{(g)}) \end{array} \right.$$

TSO du potentiel visco-plastique $\psi_{\mathsf{vp},s}(\mathcal{A}_{\mathsf{vp},s},\mathcal{A}_{\mathsf{p},i})$ [**Décomposé**]

$$<\psi_{\mathsf{vp},s}^{\mathsf{TSO}}(\mathcal{A}_{\mathsf{vp},s},\mathcal{A}_{\mathsf{p},i})>^{(g)} = \psi_{\mathsf{vp},s}(\bar{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp},s}^{(g)},\bar{\mathcal{A}}_{\mathsf{p},i}^{(g)}) + \frac{\partial^2 \psi_{\mathsf{vp},s}}{\partial \mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}\partial \mathcal{A}_{\mathsf{p},i}}\,C^{(g)}\left(\mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}^{(g)},\mathcal{A}_{\mathsf{p},i}^{(g)}\right)$$
$$\left| \begin{array}{l} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 \psi_{\mathsf{vp},s}}{\partial \mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}^2}\,C^{(g)}\left(\mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}^{(g)}\right) + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 \psi_{\mathsf{vp},s}}{\partial \mathcal{A}_{\mathsf{p}}^2}\,C^{(g)}\left(\mathcal{A}_{\mathsf{p},i}^{(g)}\right) \end{array} \right.$$

TSO du potentiel écrouissage $\psi_{\mathsf{p},i}(\mathcal{A}_{\mathsf{vp},s},\mathcal{A}_{\mathsf{p},i})$ [**Décomposé**]

$$<\psi_{\mathsf{p},i}^{\mathsf{TSO}}(\mathcal{A}_{\mathsf{vp},s},\mathcal{A}_{\mathsf{p},i})>^{(g)} = \psi_{\mathsf{p},i}(\bar{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp},s}^{(g)},\bar{\mathcal{A}}_{\mathsf{p},i}^{(g)}) + \frac{\partial^2 \psi_{\mathsf{p},i}}{\partial \mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}\partial \mathcal{A}_{\mathsf{p},i}}\,C^{(g)}\left(\mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}^{(g)},\mathcal{A}_{\mathsf{p},i}^{(g)}\right)$$
$$\left| \begin{array}{l} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 \psi_{\mathsf{p},i}}{\partial \mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}^2}\,C^{(g)}\left(\mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}^{(g)}\right) + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 \psi_{\mathsf{p},i}}{\partial \mathcal{A}_{\mathsf{p},i}^2}\,C^{(g)}\left(\mathcal{A}_{\mathsf{p},i}^{(g)}\right) \end{array} \right.$$

(V.14)

TSO du potentiel visco-plastique $\psi_{\mathsf{vp},s}(\mathcal{A}_{\mathsf{vp},s},\mathcal{A}_{\mathsf{p},i})$ [**Uniforme par grain**]

$$<\psi_{\mathsf{vp},s}^{\mathsf{TSO}}(\mathcal{A}_{\mathsf{vp},s},\mathcal{A}_{\mathsf{p},i})>^{(g)} = \psi_{\mathsf{vp},s}(\bar{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp},s}^{(g)},\bar{\mathcal{A}}_{\mathsf{p},i}^{(g)}) + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 \psi_{\mathsf{vp},s}}{\partial \mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}^2}\,C^{(g)}\left(\mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}^{(g)}\right)$$

TSO du potentiel écrouissage $\psi_{\mathsf{p},i}(\mathcal{A}_{\mathsf{vp},s},\mathcal{A}_{\mathsf{p},i})$ [**Uniforme par grain**]

$$<\psi_{\mathsf{p},i}^{\mathsf{TSO}}(\mathcal{A}_{\mathsf{vp},s},\mathcal{A}_{\mathsf{p},i})>^{(g)} = \psi_{\mathsf{p},i}(\bar{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp},s}^{(g)},\bar{\mathcal{A}}_{\mathsf{p},i}^{(g)}) + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 \psi_{\mathsf{p},i}}{\partial \mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}^2}\,C^{(g)}\left(\mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}^{(g)}\right)$$

$$\text{Avec :} \left\| \begin{array}{ll} C^{(g)}(X,Y) & = <\left(X-\bar{X}^{(g)}\right)\left(Y-\bar{Y}^{(g)}\right)>^{(g)} \\ C^{(g)}(X) & = <\left(X-\bar{X}^{(g)}\right)^2>^{(g)} \\ \bar{X}^{(g)} & =<X>^{(g)} \\ <\cdot>^{(g)} & = \frac{1}{|V^{(g)}|}\int_{V^{(g)}} \cdot \,\mathrm{d}\boldsymbol{x} \end{array} \right.$$

Finalement en s'appuyant sur les équations faisant le lien entre forces réduites et potentiels de force homogénéisés (cf. Eq. V.13) et les équations explicitant l'expression de ces potentiels de force homogénéisés après avoir effectué deux approximations successives (cf. Eq. V.14), il est possible d'expliciter les équations d'évolution des forces thermodynamiques réduites (cf. Eq. V.15).

Évolution des forces thermodynamiques $a_{\mathsf{vp}}^{(k)}$

$$\dot{a}_{\mathsf{vp}}^{(k)} : \left| \begin{array}{rl} \dot{a}_{\mathsf{vp}}^{(k)} & = \dfrac{\partial a_{\mathsf{vp}}^{(k)}}{\partial \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}} : \dot{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}} + \dfrac{\partial \psi_{\mathsf{vp}}^{\mathsf{hom}}}{\partial \xi_{\mathsf{vp}}^{(k)}} \\ & = \dfrac{\partial a_{\mathsf{vp}}^{(k)}}{\partial \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}} : \dot{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}} + \sum_g c^{(g)} \sum_s \dfrac{\partial \bar{\psi}_{\mathsf{vp},s}^{\mathsf{TSO}}}{\partial \xi_{\mathsf{vp}}^{(k)}} \left(\bar{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp},s}^{(g)}, \bar{\mathcal{A}}_{\mathsf{p}}^{(g)} \right) \\ & = \dfrac{\partial a_{\mathsf{vp}}^{(k)}}{\partial \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}} : \dot{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}} + \sum_g c^{(g)} \sum_s \left[\dfrac{\partial \bar{\psi}_{\mathsf{vp},s}^{\mathsf{TSO}}}{\partial \mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}} \dfrac{\partial \bar{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp},s}^{(g)}}{\partial \xi_{\mathsf{vp}}^{(k)}} + \cancel{\dfrac{\partial \bar{\psi}_{\mathsf{vp},s}^{\mathsf{TSO}}}{\partial \mathcal{A}_{\mathsf{p}}}} \cancel{\dfrac{\partial \bar{\mathcal{A}}_{\mathsf{p}}^{(g)}}{\partial \xi_{\mathsf{vp}}^{(k)}}} \right] \\ & = \dfrac{\partial a_{\mathsf{vp}}^{(k)}}{\partial \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}} : \dot{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}} + \sum_g c^{(g)} \sum_s \dfrac{\partial \bar{\psi}_{\mathsf{vp},s}^{\mathsf{TSO}}}{\partial \mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}} \dfrac{\partial \bar{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp},s}^{(g)}}{\partial \xi_{\mathsf{vp}}^{(k)}} \end{array} \right.$$

Évolution des forces thermodynamiques $a_{\mathsf{p},i}^{(k)}$ **[Uniforme par grain]-[Décomposé]** (V.15)

$$\dot{a}_{\mathsf{p},i}^{(k)} : \left| \begin{array}{rl} \dot{a}_{\mathsf{p},i}^{(k)} & = \dfrac{\partial \psi_{\mathsf{p}}^{\mathsf{hom}}}{\partial \xi_{\mathsf{p},i}^{(k)}} \\ & = \sum_g c^{(g)} \sum_s \dfrac{\partial \bar{\psi}_{\mathsf{p},i}^{\mathsf{TSO}}}{\partial \xi_{\mathsf{p},i}^{(k)}} \left(\bar{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp},s}^{(g)}, \bar{\mathcal{A}}_{\mathsf{p},i}^{(g)} \right) \\ & = \sum_g c^{(g)} \sum_s \left[\cancel{\dfrac{\partial \bar{\psi}_{\mathsf{p},i}^{\mathsf{TSO}}}{\partial \mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}}} \cancel{\dfrac{\partial \bar{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp},s}^{(g)}}{\partial \xi_{\mathsf{p},i}^{(k)}}} + \dfrac{\partial \bar{\psi}_{\mathsf{p},i}^{\mathsf{TSO}}}{\partial \mathcal{A}_{\mathsf{p},i}} \dfrac{\partial \bar{\mathcal{A}}_{\mathsf{p},i}^{(g)}}{\partial \xi_{\mathsf{p},i}^{(k)}} \right] \\ & = \sum_g c^{(g)} \sum_s \dfrac{\partial \bar{\psi}_{\mathsf{p},i}^{\mathsf{TSO}}}{\partial \mathcal{A}_{\mathsf{p},i}} \dfrac{\partial \bar{\mathcal{A}}_{\mathsf{p},i}^{(g)}}{\partial \xi_{\mathsf{p},i}^{(k)}} \end{array} \right.$$

Avec :

$$\left\| \begin{array}{ll} \bar{\psi}_{\mathsf{vp},s}^{\mathsf{TSO}} & = < \psi_{\mathsf{vp},s}^{\mathsf{TSO}}(\mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}, \mathcal{A}_{\mathsf{p},i}) >^{(g)} \\ \bar{\psi}_{\mathsf{p}}^{\mathsf{TSO}} & = < \psi_{\mathsf{p},i}^{\mathsf{TSO}}(\mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}, \mathcal{A}_{\mathsf{p},i}) >^{(g)} \end{array} \right.$$

V.2.4 Étape 4 : Implémentation numérique

L'expression des forces thermodynamiques réduites $(a_{\mathsf{vp}}, a_{\mathsf{p},i})$ associées aux nouvelles variables internes réduites $(\xi_{\mathsf{vp}}, \xi_{\mathsf{p},i})$ sont connues (cf. Eq. V.18). Les équations d'évolution des forces réduites sont connues (cf. Eq. V.16). Le problème est maintenant complet.

La résolution numérique se fait via un algorithme piloté en déformation et à direction de contrainte imposée. Cette résolution est tirée de [**Michel et al. 1999**]. L'algorithme se base sur les systèmes d'équations Eq. V.18 pour le lien entre les forces réduites et les variables internes réduites, Eq. V.16 pour les équations d'évolution des variables réduites, Eq. V.17 pour les équations servant dans la résolution numérique. Le schéma de résolution est présenté Eq. V.19. Une méthode de Runge Kutta d'ordre 4-5 est utilisée pour l'intégration numérique des équations différentielles couplées portant sur l'évolution des forces thermodynamiques réduites $(a_{\mathsf{vp}}, a_{\mathsf{p},i})^*$. À ce niveau, le critère portant sur la valeur absolue de l'erreur commise est fixé à 10^{-3} et la valeur relative est fixée à 10^{-6}. Pour ce qui est de la boucle de convergence sur la déformation (recherche du bon $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\boldsymbol{i}}$ soit du bon $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(t+dt)$), le

critère de convergence est un critère relatif contrôlé par la valeur du coefficient δ qui est fixée ici à $\delta = 10^{-6}$.

Évolution des forces réduites $a^{(k)}_{\mathsf{vp}}$ **[Décomposé]**

$$\begin{aligned}\dot{a}^{(k)}_{\mathsf{vp}} = \boldsymbol{a^{(k)}} : \dot{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}} + \sum_g c^{(g)} \sum_s \Bigg[& \dot{\gamma}^{\mathsf{vp}}_s \left(\bar{\mathcal{A}}^{(g)}_{\mathsf{vp},s},\, \bar{\mathcal{A}}^{(g)}_{\mathsf{p},i} \right) \frac{\partial \bar{\mathcal{A}}^{(g)}_{\mathsf{vp},s}}{\partial \xi^{(k)}_{\mathsf{vp}}} \\ & + \frac{1}{2} \frac{\partial \dot{\gamma}^{\mathsf{vp}}_s}{\partial \mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}} \frac{\partial C^{(g)}}{\partial \xi^{(k)}_{\mathsf{vp}}} \left(\mathcal{A}^{(g)}_{\mathsf{vp},s} \right) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \dot{\gamma}^{\mathsf{vp}}_s}{\partial \mathcal{A}^2_{\mathsf{vp},s}} C^{(g)} \left(\mathcal{A}^{(g)}_{\mathsf{vp},s} \right) \frac{\partial \bar{\mathcal{A}}^{(g)}_{\mathsf{vp},s}}{\partial \xi^{(k)}_{\mathsf{vp}}} \\ & + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \dot{\gamma}^{\mathsf{vp}}_s}{\partial \mathcal{A}^2_{\mathsf{p},i}} C^{(g)} \left(\mathcal{A}^{(g)}_{\mathsf{p},i} \right) \frac{\partial \bar{\mathcal{A}}^{(g)}_{\mathsf{vp},s}}{\partial \xi^{(k)}_{\mathsf{vp}}} \\ & + \frac{\partial \dot{\gamma}^{\mathsf{vp}}_s}{\partial \mathcal{A}_{\mathsf{p},i}} \frac{\partial C^{(g)}}{\partial \xi^{(k)}_{\mathsf{vp}}} \left(\mathcal{A}^{(g)}_{\mathsf{vp},s}, \mathcal{A}^{(g)}_{\mathsf{p},i} \right) + \frac{\partial^2 \dot{\gamma}^{\mathsf{vp}}_s}{\partial \mathcal{A}_{\mathsf{vp},s} \partial \mathcal{A}_{\mathsf{p},i}} C^{(g)} \left(\mathcal{A}^{(g)}_{\mathsf{vp},s}, \mathcal{A}^{(g)}_{\mathsf{p},i} \right) \frac{\partial \bar{\mathcal{A}}^{(g)}_{\mathsf{vp},s}}{\partial \xi^{(k)}_{\mathsf{vp}}} \Bigg] \end{aligned}$$

Évolution des forces réduites $a^{(k)}_{\mathsf{p},i}$ **[Décomposé]**

$$\begin{aligned}\dot{a}^{(k)}_{\mathsf{p},i} = \sum_g c^{(g)} \sum_s \Bigg[& \dot{\gamma}^{\mathsf{p},i}_s \left(\bar{\mathcal{A}}^{(g)}_{\mathsf{vp},s},\, \bar{\mathcal{A}}^{(g)}_{\mathsf{p},i} \right) \frac{\partial \bar{\mathcal{A}}^{(g)}_{\mathsf{p},i}}{\partial \xi^{(k)}_{\mathsf{p},i}} \\ & + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \dot{\gamma}^{\mathsf{p},i}_s}{\partial \mathcal{A}^2_{\mathsf{vp},s}} C^{(g)} \left(\mathcal{A}^{(g)}_{\mathsf{vp},s} \right) \frac{\partial \bar{\mathcal{A}}^{(g)}_{\mathsf{p},i}}{\partial \xi^{(k)}_{\mathsf{p},i}} \\ & + \frac{1}{2} \frac{\partial \dot{\gamma}^{\mathsf{p},i}_s}{\partial \mathcal{A}_{\mathsf{p},i}} \frac{\partial C^{(g)}}{\partial \xi^{(k)}_{\mathsf{p},i}} \left(\mathcal{A}^{(g)}_{\mathsf{p},i} \right) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \dot{\gamma}^{\mathsf{p},i}_s}{\partial \mathcal{A}^2_{\mathsf{p},i}} C^{(g)} \left(\mathcal{A}^{(g)}_{\mathsf{p},i} \right) \frac{\partial \bar{\mathcal{A}}^{(g)}_{\mathsf{p},i}}{\partial \xi^{(k)}_{\mathsf{p},i}} \\ & + \frac{\partial \dot{\gamma}^{\mathsf{p},i}_s}{\partial \mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}} \frac{\partial C^{(g)}}{\partial \xi^{(k)}_{\mathsf{p},i}} \left(\mathcal{A}^{(g)}_{\mathsf{vp},s}, \mathcal{A}^{(g)}_{\mathsf{p},i} \right) + \frac{\partial^2 \dot{\gamma}^{\mathsf{p},i}_s}{\partial \mathcal{A}_{\mathsf{vp},s} \partial \mathcal{A}_{\mathsf{p},i}} C^{(g)} \left(\mathcal{A}^{(g)}_{\mathsf{vp},s}, \mathcal{A}^{(g)}_{\mathsf{p},i} \right) \frac{\partial \bar{\mathcal{A}}^{(g)}_{\mathsf{p},i}}{\partial \xi^{(k)}_{\mathsf{p},i}} \Bigg] \end{aligned} \tag{V.16}$$

Évolution des forces réduites $a^{(k)}_{\mathsf{vp}}$ **[Uniforme par grain]**

$$\begin{aligned}\dot{a}^{(k)}_{\mathsf{vp}} = \boldsymbol{a^{(k)}} : \dot{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}} + \sum_g c^{(g)} \sum_s \Bigg[& \dot{\gamma}^{\mathsf{vp}}_s \left(\bar{\mathcal{A}}^{(g)}_{\mathsf{vp},s},\, \bar{\mathcal{A}}^{(g)}_{\mathsf{p},i} \right) \frac{\partial \bar{\mathcal{A}}^{(g)}_{\mathsf{vp},s}}{\partial \xi^{(k)}_{\mathsf{vp}}} \\ & + \frac{1}{2} \frac{\partial \dot{\gamma}^{\mathsf{vp}}_s}{\partial \mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}} \frac{\partial C^{(g)}}{\partial \xi^{(k)}_{\mathsf{vp}}} \left(\mathcal{A}^{(g)}_{\mathsf{vp},s} \right) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \dot{\gamma}^{\mathsf{vp}}_s}{\partial \mathcal{A}^2_{\mathsf{vp},s}} C^{(g)} \left(\mathcal{A}^{(g)}_{\mathsf{vp},s} \right) \frac{\partial \bar{\mathcal{A}}^{(g)}_{\mathsf{vp},s}}{\partial \xi^{(k)}_{\mathsf{vp}}} \Bigg] \end{aligned}$$

Évolution des forces réduites $a^{(k)}_{\mathsf{p},i}$ **[Uniforme par grain]**

$$\dot{a}^{(k)}_{\mathsf{p},i} = \sum_g c^{(g)} \sum_s \left[\dot{\gamma}^{\mathsf{p},i}_s \left(\bar{\mathcal{A}}^{(g)}_{\mathsf{vp},s},\, \bar{\mathcal{A}}^{(g)}_{\mathsf{p},i} \right) \frac{\partial \bar{\mathcal{A}}^{(g)}_{\mathsf{p},i}}{\partial \xi^{(k)}_{\mathsf{p},i}} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \dot{\gamma}^{\mathsf{p},i}_s}{\partial \mathcal{A}^2_{\mathsf{vp},s}} C^{(g)} \left(\mathcal{A}^{(g)}_{\mathsf{vp},s} \right) \frac{\partial \bar{\mathcal{A}}^{(g)}_{\mathsf{p},i}}{\partial \xi^{(k)}_{\mathsf{p},i}} \right]$$

Il est possible d'apercevoir et de remarquer la différence de complexité induite par les deux décompositions considérées, différence entre le cas décomposé et le cas uniforme par grain, dans l'équation différentielle à implémenter numériquement (cf. Eq. V.16).

Dans le cas décomposé, la variable d'écrouissage n'est plus uniforme par grain, ce qui implique que les moments croisés $C^{(g)} \left(\mathcal{A}^{(g)}_{\mathsf{vp},s}, \mathcal{A}^{(g)}_{\mathsf{p},i} \right)$ et le second moment $C^{(g)} \left(\mathcal{A}^{(g)}_{\mathsf{vp},s}, \mathcal{A}^{(g)}_{\mathsf{p},i} \right)$ ne sont plus nuls. Ceci alourdit les équations en multipliant le nombre de dérivés à calculer et complexifie la résolution

∗. Utilisation de la classe scipy.integrate.ode (version 0.15.1 de scipy) et de Dopri5 pour l'intégration numérique. Dopri5 est une méthode explicite de Runge Kutta d'ordre (4)5 à imputer à Dormand & Prince (avec pas adaptatif) voir éventuellement : E. Hairer, S.P. Norsett and G. Wanner, Solving Ordinary Differential Equations i. Nonstiff Problems. 2nd edition. Springer Series in Computational Mathematics, Springer-Verlag (1993), pour plus de détails sur dopri5.

numérique. En effet, il est nécessaire de calculer et stocker plus de coefficients comme les moments croisés et le second moment mentionnés précédemment en plus des différentes dérivées de la loi d'évolution par rapport à la variable thermodynamique associée à la variable d'écrouissage.

Il est alors légitime de se demander si la complexité introduite en vaut ou non la peine. Deux éléments peuvent servir à légitimer ou non une complexification des équations et de l'implémentation numérique. Le premier est de regarder la variation de l'écart entre les deux décompositions vis-à-vis de la réponse en champ complet prise comme référence. Le deuxième est de regarder le temps de calcul nécessaire à la résolution numérique du problème d'ordre réduit. Ce dernier est mentionné dans la comparaison sur des essais de compression uniaxés.

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{x},t) &= \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}) : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(t) + \sum_{l}^{M_{\mathsf{vp}}} \boldsymbol{D} * \boldsymbol{\mu}_{\mathsf{vp}}^{(l)}(\boldsymbol{x})\, \xi_{\mathsf{vp}}^{(l)}(t) \\
\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{x},t) &= \boldsymbol{L} : \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}) : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(t) + \sum_{l}^{M_{\mathsf{vp}}} \boldsymbol{\rho}_{\mathsf{vp}}^{(l)}(\boldsymbol{x})\, \xi_{\mathsf{vp}}^{(l)}(t) \\
\mathcal{A}_{\mathsf{vp},s} &= \boldsymbol{L} : \boldsymbol{A} : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} : \boldsymbol{m_s} + \sum_{l}^{M_{\mathsf{vp}}} \boldsymbol{\rho}_{\mathsf{vp}}^{(l)} : \boldsymbol{m_s}\, \xi_{\mathsf{vp}}^{(l)} \\
\bar{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp},s}^{(g)} &= < \boldsymbol{L} : \boldsymbol{A} >^{(g)} : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} : \boldsymbol{m_s}^{(g)} + \sum_{l}^{M_{\mathsf{vp}}} < \boldsymbol{\rho}_{\mathsf{vp}}^{(l)} >^{(g)} : \boldsymbol{m_s}^{(g)}\, \xi_{\mathsf{vp}}^{(l)} \\
\text{Avec :} \left\| \right. & \begin{array}{ll}
\boldsymbol{\sigma} & = \boldsymbol{L} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}) \\
\boldsymbol{\rho}_{\mathsf{vp}}^{(l)} & = \boldsymbol{L} : (\boldsymbol{D} * \boldsymbol{\mu}_{\mathsf{vp}}^{(l)} - \boldsymbol{\mu}_{\mathsf{vp}}^{(l)}) \\
\boldsymbol{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp}} & = \boldsymbol{L} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}) \\
\mathcal{A}_{\mathsf{vp},s} & = \boldsymbol{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp}} : \boldsymbol{m_s}
\end{array}
\end{aligned}
\tag{V.17}
$$

Lien forces réduites $a^{(k)}_{\mathsf{vp}}$ et variables réduites $\xi^{(k)}_{\mathsf{vp}}$

$$a^{(k)}_{\mathsf{vp}} = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} : \boldsymbol{a^{(k)}} + \sum_l < \boldsymbol{\mu^{(k)}_{\mathsf{vp}}} : \boldsymbol{\rho^{(l)}_{\mathsf{vp}}} > \xi^{(l)}_{\mathsf{vp}}$$

$$a^{(k)}_{\mathsf{vp}} = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} : \boldsymbol{a^{(k)}} + \sum_l D^{(kl)}_{\mathsf{vp}} \xi^{(l)}_{\mathsf{vp}}$$

En posant : $\left| \begin{array}{l} D^{(kl)}_{\mathsf{vp}} = < \boldsymbol{\mu^{(k)}_{\mathsf{vp}}} : \boldsymbol{\rho^{(l)}_{\mathsf{vp}}} > \\ \boldsymbol{G_{\mathsf{vp}}} = \boldsymbol{D^{-1}_{\mathsf{vp}}} \, [M_{\mathsf{vp}} \; M_{\mathsf{vp}}] \end{array} \right.$

$$\xi^{(k)}_{\mathsf{vp}}(t+dt) = \sum_l G^{(kl)}_{\mathsf{vp}} \left(a^{(l)}_{\mathsf{vp}}(t+dt) - \boldsymbol{a^{(l)}} : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(t+dt) \right)$$

Lien forces réduites $a^{(k)}_{\mathsf{p},i}$ et variables réduites $\xi^{(k)}_{\mathsf{p},i}$ **[Décomposé]**

$$a^{(k)}_{\mathsf{p},i} = -\tau^0_i \; < \mu^{(k)}_{\mathsf{p},i} > - h_i \sum_l < \mu^{(k)}_{\mathsf{p},i} \mu^{(l)}_{\mathsf{p},i} > \xi^{(l)}_{\mathsf{p},i} \tag{V.18}$$

$$a^{(k)}_{\mathsf{p},i} = -\tau^0_i \; < \mu^{(k)}_{\mathsf{p},i} > + \sum_l D^{(kl)}_{\mathsf{p}} \xi^{(l)}_{\mathsf{p}}$$

En posant : $\left| \begin{array}{l} D^{(kl)}_{\mathsf{p},i} = -h_i \; < \mu^{(k)}_{\mathsf{p},i} \mu^{(l)}_{\mathsf{p},i} > \\ \boldsymbol{G_{\mathsf{p},i}} = \boldsymbol{D^{-1}_{\mathsf{p},i}} \, [M_{\mathsf{p},i} \; M_{\mathsf{p},i}] \end{array} \right.$

$$\xi^{(k)}_{\mathsf{p}}(t+dt) = \sum_l G^{(kl)}_{\mathsf{p},i} \left(a^{(l)}_{\mathsf{p}}(t+dt) + \tau^0_i \; < \mu^{(k)}_{\mathsf{p},i} > \right)$$

Lien forces réduites $a^{(g)}_{\mathsf{p},i}$ et variables réduites $\xi^{(g)}_{\mathsf{p},i}$ **[Uniforme par grain]**

$$a^{(g)}_{\mathsf{p},i} = -\tau^0_i \; c^{(g)} - h_i \; \xi^{(g)}_{\mathsf{p},i} \; c^{(g)}$$

$$\xi^{(g)}_{\mathsf{p},i}(t+dt) = -\frac{1}{h_i \; c^{(g)}} \; \left(a^{(g)}_{\mathsf{p},i}(t+dt) + \tau^0_i \; c^{(g)} \right)$$

Dans la suite, la notation suivante est adoptée $\boldsymbol{S^{\mathsf{hom}}} =< \boldsymbol{L} : \boldsymbol{A} >^{-1}$.

Un complément sur les termes intervenant dans l'implémentation numérique est précisé dans l'Annexe F. En particulier, les tenseurs de Schmid des familles utilisées sont précisés, les valeurs numériques des coefficients intervenant dans la loi d'évolution sont rappelées, enfin un complément est fait sur les différentes expressions intervenant dans l'implémentation numérique du modèle NTFA.

Algorithme itératif de résolution :

Boucle sur le temps : entre (t_0) et $(t_0 + dt)$

▶ Intervalle de résolution : $I = [t_0,\, t_0 + dt]$

▶ Initialisation $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\boldsymbol{i}}$: $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\boldsymbol{i}} = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(t_0) + (\dot{\bar{\varepsilon}}\, dt)\, \dfrac{\boldsymbol{S}^{\mathsf{hom}} : \bar{\boldsymbol{\sigma}}_{\mathbf{0}}}{\bar{\boldsymbol{\sigma}}_{\mathbf{0}} : \boldsymbol{S}^{\mathsf{hom}} : \bar{\boldsymbol{\sigma}}_{\mathbf{0}}}$

Avec :
- $\dot{\bar{\varepsilon}}$ vitesse de déformation imposée dans l'essai,
- $\bar{\boldsymbol{\sigma}}_{\mathbf{0}}$ direction de contrainte imposée.

Boucle itérative sur i :

▷ Calcul de la vitesse de déformation (supposée constante sur I) :

$$\dot{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}}_{\boldsymbol{i}} = \frac{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\boldsymbol{i}} - \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(t_0)}{dt}$$

▷ Calcul de $(\boldsymbol{a}_{\mathsf{vp}}^{(\boldsymbol{k})}, \boldsymbol{a}_{\mathsf{p}}^{(\boldsymbol{k})})(t_0 + dt)$ **par RK45 :** $t \in I$

▶ Condition Initiale : $(\boldsymbol{a}_{\mathsf{vp}-\mathbf{0}}, \boldsymbol{a}_{\mathsf{p}-\mathbf{0}})$

▶ [1] RK45 approxime : $(\boldsymbol{a}_{\mathsf{vp}}, \boldsymbol{a}_{\mathsf{p}})(t)$

▶ [2] Calcul de la déformation courante :
$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(t) = \dot{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}}_{\boldsymbol{i}}\, (t - t_0) + \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(t_0)$

▶ [3] Calcul des variables internes homogénéisées :
$(\boldsymbol{\xi}_{\mathsf{vp}}, \boldsymbol{\xi}_{\mathsf{p}})(t)$ avec [1] et [2] cf. Eq. V.18

▶ [4] Calcul des variables thermodynamiques :
$(\boldsymbol{a}_{\mathsf{vp}}, \boldsymbol{a}_{\mathsf{p}})(t_0 + dt)$ avec [2] et [3] cf. Eq. V.16

▷ **Actualisation :**

▶ [5] Variables internes homogénéisées :
$(\boldsymbol{\xi}_{\mathsf{vp}}, \boldsymbol{\xi}_{\mathsf{p}})(t_0 + dt)$ avec [4] et $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\boldsymbol{i}}$ cf. Eq. V.18 (V.19)

▶ Contrainte effective :
$\bar{\boldsymbol{\sigma}}(t_0 + dt)$ avec [5] et $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\boldsymbol{i}}$ cf. Eq. V.17

▶ Calcul du niveau de contrainte dans la direction imposée $\bar{\boldsymbol{\sigma}}_{\mathbf{0}}$:

$$k(t_0 + dt) = \frac{\bar{\boldsymbol{\sigma}}_{\mathbf{0}} : \boldsymbol{S}^{\mathsf{hom}} : \bar{\boldsymbol{\sigma}}(t_0 + dt)}{\bar{\boldsymbol{\sigma}}_{\mathbf{0}} : \boldsymbol{S}^{\mathsf{hom}} : \bar{\boldsymbol{\sigma}}_{\mathbf{0}}}$$

▶ Calcul de la déformation macroscopique : $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\boldsymbol{i},\mathbf{1}}$
$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\boldsymbol{i},\mathbf{1}} = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\boldsymbol{i}} + \boldsymbol{S}^{\mathsf{hom}} : (k_i\, \bar{\boldsymbol{\sigma}}_{\mathbf{0}} - \bar{\boldsymbol{\sigma}}(t_0 + dt))$

▷ **Test de convergence :**

▶ **Si** $max\,(|\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\boldsymbol{i},\mathbf{1}} - \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\boldsymbol{i}}|) < \delta\, \|\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\boldsymbol{i}}\|$:

$(\boldsymbol{a}_{\mathsf{vp}-\mathbf{0}}, \boldsymbol{a}_{\mathsf{p}-\mathbf{0}}) = (\boldsymbol{a}_{\mathsf{vp}}, \boldsymbol{a}_{\mathsf{p}})(t_0 + dt)$

$t_0 = t_0 + dt$

$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(t_0) = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\boldsymbol{i},\mathbf{1}}$

▶ **Sinon :**

$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\boldsymbol{i}} = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\boldsymbol{i},\mathbf{1}}$

FIN Boucle

Impression :

$\bar{\boldsymbol{\sigma}}(t_0 + dt)$
$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(t_0 + dt)$
$k(t_0 + dt)$
$(\boldsymbol{\xi}_{\mathsf{vp}}, \boldsymbol{\xi}_{\mathsf{p}})(t_0 + dt)$

FIN Boucle temps

Chapitre VI

Construction des modes. Comparaison d'essais uniaxés entre champ complet (FFT), résultats expérimentaux et modèle d'ordre réduit NTFA TSO. Comparaison des résultats sur des essais triaxés puis quelconques entre champ complet FFT et modèle d'ordre réduit NTFA TSO.

Le modèle d'ordre réduit NTFA TSO, proposé au chapitre précédent, s'appuie sur la considération de modes. Jusqu'à présent l'hypothèse faite est que cette base de modes est entièrement déterminée. La première section a pour objectif d'expliciter la méthode utilisée pour la construction des modes sur des essais de compression uniaxés.

La deuxième section, en se basant sur cette construction des modes ainsi que sur le modèle d'ordre réduit développé au chapitre précédent, s'attache à comparer les résultats obtenus sur des essais de compression uniaxés à vitesse de déformation imposée et pour différentes températures. La comparaison est faite entre des résultats expérimentaux, des simulations en champ complet (FFT) utilisant la loi locale issue de la procédure d'identification inverse (cf. IV.3 Identification inverse de la loi locale et plus particulièrement Eq. IV.9 pour ce qui est du formalisme retenu), ainsi que les simulations numériques issues du modèle d'ordre réduit.

Enfin la dernière section traite d'essais de compression triaxés ou quelconques. Dans un premier temps la base modale utilisée est explicitée. Dans un second temps une comparaison est faite entre les résultats numériques obtenues par la méthode en champ complet (FFT) et les résultats numériques obtenus par le modèle d'ordre réduit proposé.

Il est à rappeler que l'ensemble des simulations numériques sont effectuées en utilisant un algorithme piloté en déformation à direction de contrainte imposée.

VI.1 Construction des modes pour des essais de compression uniaxés

Il n'existe pas qu'une et une seule méthode pour obtenir la base modale alimentant le modèle d'ordre réduit. La suite s'attache à expliciter une méthode empirique pour des essais de compression

uniaxés à vitesse de déformation imposée et pour différentes températures. Ici une certaine gamme de sollicitations, dite de références, est étudiée avec la température $T_0 \in [1000, 2600]\,[°C]$ et la vitesse de déformation macroscopique $\dot{\bar{\varepsilon}}_0 = 10^{-1}\,[s]^{-1}$. La méthode considérée s'appuie sur deux points. Le premier consiste à relever d'une certaine manière un certain nombre d'instantanés des champs à décomposer. Le deuxième consiste à déduire de cette relève les modes à considérer pour le chargement et les conditions de sollicitation étudiés.

Les essais de compression uniaxés sont menés sur un VER à 500 grains, avec une résolution de 135^3 voxels. Les essais numériques sont pilotés en déformation à direction de contrainte imposée. La direction de contrainte imposée est $\Sigma_0 = [0, 0, 1, 0, 0, 0]$ (notation de Kelvin). Une valeur de la déformation finale $\bar{\varepsilon}_{\mathsf{max}}$ est imposée avec $\bar{\varepsilon}_{\mathsf{max}} = \bar{\varepsilon} : \Sigma_0\,[\%]$ où Σ_0 est la direction de contrainte imposée, et $\bar{\varepsilon}$ le tenseur macroscopique des déformations totales.

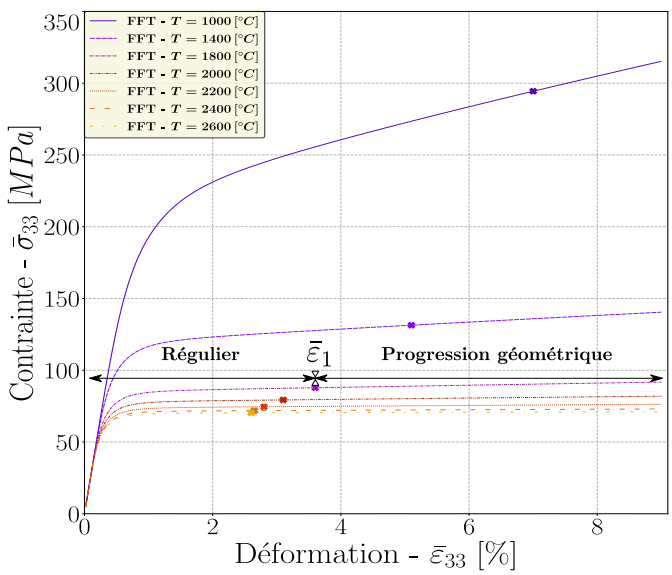
Il est supposé dans la suite que pour un chargement donné, un régime visco-plastique établi existe à partir d'une certaine déformation effective $\bar{\varepsilon}_1$, déformation qui est inférieure ou égale à la déformation maximale $\bar{\varepsilon}_1 \leqslant \bar{\varepsilon}_{\mathsf{max}}$.

VI.1.1 Relève des instantanés

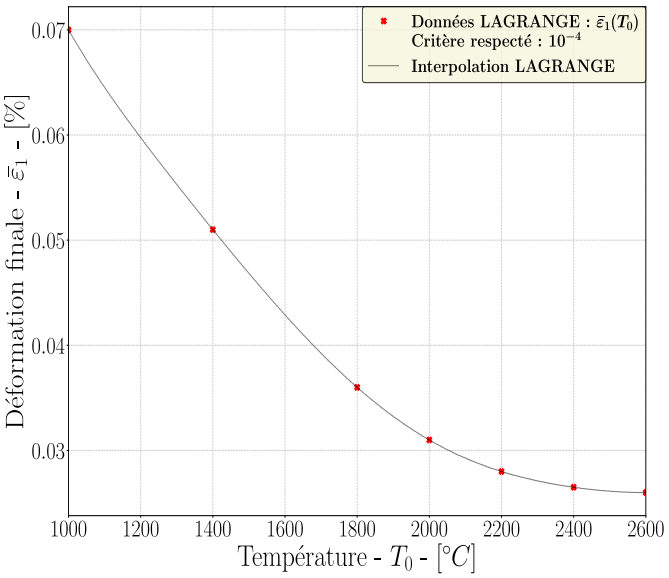
La relève des instantanés se fait a posteriori. En d'autres termes, il est nécessaire d'effectuer une simulation en champ complet. De cette simulation, la déformation $\bar{\varepsilon}_1$ est déduite de manière empirique. La déformation $\bar{\varepsilon}_1$ est jugée bonne lorsque la POD (Proper Orthogonal Decomposition) donne 4-5 modes avec un critère de sélection $\alpha = 10^{-4}$ (cf. Eq. VI.2 pour la définition de α, équation qui est présenté dans la suite de cette section).

Sur l'intervalle $\bar{\varepsilon} \in [0, \bar{\varepsilon}_1]$, 20 instantanés sont relevés de manière régulière avec un pas p constant : $p = \dfrac{\bar{\varepsilon}_1}{20}$. Sur l'intervalle $\bar{\varepsilon} \in [\bar{\varepsilon}_1, \bar{\varepsilon}_{\mathsf{max}}]$, la relève des instantanés suit une progression géométrique afin de limiter le nombre d'instantanés dans le régime établi. En notant $\bar{\varepsilon}_{\mathsf{n}} = \bar{\varepsilon}_1 r^{n-1}$ les n déformations de relève dans l'intervalle $\bar{\varepsilon} \in [\bar{\varepsilon}_1, \bar{\varepsilon}_{\mathsf{max}}]$. La raison de la suite géométrique, r, est déduite de la relation imposée $\bar{\varepsilon}_2 - \bar{\varepsilon}_1 = p$ soit : $r = 1 + \frac{p}{\bar{\varepsilon}_1}$. Finalement il reste à déterminer le nombre n d'instantanés à relever. En s'appuyant sur $\bar{\varepsilon}_n = \bar{\varepsilon}_{\mathsf{max}}$, n est déduit : $n = E(\dfrac{ln(\frac{\bar{\varepsilon}_{\mathsf{max}}}{\bar{\varepsilon}_1})}{ln(r)} + 1)$. La relève des instantanés est illustrée Fig. VI.1 :(a) pour $\bar{\varepsilon}_{\mathsf{max}} = 9\,[\%]$. Il est observé une forte variation de la réponse mécanique en fonction de la température. Pour quelques températures choisies, ici $T = [|1000, 1400, 1800, 2000, 2200, 2400, 2600|]\,[°C]$, les différentes valeurs de $\bar{\varepsilon}_1$ sont obtenues. Enfin à l'aide des polynômes d'interpolation de Lagrange, $\bar{\varepsilon}_1(T_0)$ est déduite avec $T_0 \in [1000, 2600]\,[°C]$. La variation de $\bar{\varepsilon}_1(T_0)$ est illustrée Fig. VI.1 :(b). Les instantanés se trouvant dans le régime élastique pur sont écartés, les autres sont gardés.

À ce stade les instantanés noté $\boldsymbol{\theta}$ dans la suite, sont entièrement déterminés via cette procédure pour un chargement et une condition de sollicitation donnés. Cette relève d'instantanés se fait pour les variables internes nécessitant une décomposition : tenseur des déformations visco-plastiques $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}(\boldsymbol{x}, t_{(k)})$ et variable d'écrouissage isotrope $p_i(\boldsymbol{x}, t_{(k)})$. De ces instantanés des matrices de corrélation globales sont construites (cf. Eq. VI.1).



(a) Calibration des instantanées dans le coude. Détermination empirique de $\bar{\varepsilon}_1$ et relève des instantanés. Impact de la variation de la température T pour des essais numériques menés à $\dot{\bar{\varepsilon}}_0 = 10^{-1}\,[s]^{-1}$.



(b) Utilisation de l'interpolation de Lagrange pour déterminer $\bar{\varepsilon}_1(T_0)$.

FIGURE VI.1 – Procédure de relève des instantanés. Détermination pour quelques essais de $\bar{\varepsilon}_1$ puis interpolation de ces valeurs pour obtenir $\bar{\varepsilon}_1(T_0)$.

Relève d'instantanés pour les variables décomposées.

$$\boldsymbol{\theta}_{\mathsf{vp}}^{(k)}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}(\boldsymbol{x}, t_{(k)})$$

Avec :
- $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathsf{vp}}$ Tenseur des déformations visco-plastiques,
- $\boldsymbol{\theta}_{\mathsf{vp}}^{(k)}$ tenseur confondu avec la variable interne au temps considéré,
- $t_{(k)}$ temps de la simulation considéré.

$$\theta_{\mathsf{p},i}^{(k)}(\boldsymbol{x}) = p_{\mathsf{i}}(\boldsymbol{x}, t_{(k)})$$

Avec :
- p Variable d'écrouissage isotrope,
- $\theta_{\mathsf{p},i}^{(k)}$ scalaire confondu avec la variable interne au temps considéré,
- $t_{(k)}$ temps de la simulation considéré,

(VI.1)

Construction des matrices de corrélation.

$$g_{\mathsf{vp}}^{ij} = < \boldsymbol{\theta}_{\mathsf{vp}}^{(i)} : \boldsymbol{\theta}_{\mathsf{vp}}^{(j)} >$$

Avec :
- $\boldsymbol{g}_{\mathsf{vp}}$ Matrice de corrélation visco-plastique globale.

$$g_{\mathsf{p},i}^{ij} = < \theta_{\mathsf{p},i}^{(i)}\, \theta_{\mathsf{p},i}^{(j)} >$$

Avec :
- $\boldsymbol{g}_{\mathsf{p},i}$ Matrice de corrélation d'écrouissage globale.

VI.1.2 Construction des modes

Les matrices de corrélation globales ainsi construites sont symétriques d'après Eq. VI.1 et positive d'après Eq. VI.2 (relation liant les valeurs propres de la matrice de corrélation aux modes construits

via cette matrice). En utilisant le théorème spectral, les matrices de corrélation sont diagonalisables et leurs valeurs propres sont positives ou nulles. Les valeurs propres sont normalisées par la somme de l'ensemble des valeurs propres (cf. Eq. VI.2) et classées de manière décroissante. Un certain critère α est posé et sert à quantifier le taux d'information restitué sur la quantité d'information fournie via la matrice de corrélation. Une fois que le nombre de valeurs propres à considérer pour satisfaire le critère est déterminé, les modes correspondant sont construits via la Proper Orthogonal Decomposition (POD) ou transformée de Karhunen-Loève (cf. Eq. VI.2).

Le critère détermine donc le taux d'information restitué sur le taux d'information fourni (les instantanés) et conditionne le nombre de modes qu'il faut considérer dans le modèle. En pratique le critère est déterminé pour qu'un ajout de modes n'ait pas ou très peu d'impact dans la réponse du modèle. Ce critère est donc dépendant du problème considéré. Ici le critère est fixé à la valeur $\alpha = 10^{-4}$.

$$\boldsymbol{g}\ \boldsymbol{v^{(k)}} = \lambda^{(k)}\ \boldsymbol{v^{(k)}}$$

Avec :

$\boldsymbol{g}$	Matrice de corrélation globale,
$\boldsymbol{v^{(k)}}$	vecteur propre,
$\lambda^{(k)}$	valeur propre correspondante.

Critère de sélection des valeurs propres :

$$\frac{\sum_{k}^{N} \lambda^{(k)}}{\sum_{k}^{N_T} \lambda^{(k)}} > 1 - \alpha$$

Avec :

α	Paramètre de sélection,
N	le nombre de valeurs propres pour satisfaire le critère,
N_T	le nombre total de valeurs propres.

(VI.2)

Construction des modes :

$$\boldsymbol{\mu}^{(k)}_{\mathsf{vp}}(\boldsymbol{x}) = \sum_{l}^{N_T} v^{(k)}_{l,\mathsf{vp}}\ \boldsymbol{\theta}^{(l)}_{\mathsf{vp}}(\boldsymbol{x})$$

$$< \boldsymbol{\mu}^{(k)}_{\mathsf{vp}}(\boldsymbol{x}) : \boldsymbol{\mu}^{(p)}_{\mathsf{vp}}(\boldsymbol{x}) > = \begin{cases} \lambda^{(k)} & \text{Si } k = p \\ 0 & \text{Sinon} \end{cases}$$

$$\mu^{(k)}_{\mathsf{p},i}(\boldsymbol{x}) = \sum_{l}^{N_T} v^{(k)}_{l,\mathsf{p}}\ \theta^{(l)}_{\mathsf{p},i}(\boldsymbol{x})$$

$$< \mu^{(k)}_{\mathsf{p},i}(\boldsymbol{x}) \times \mu^{(l)}_{\mathsf{p},i}(\boldsymbol{x}) > = \begin{cases} \lambda^{(k)} & \text{Si } k = l \\ 0 & \text{Sinon} \end{cases}$$

À ce stade les modes sont entièrement déterminés pour un chargement et une condition de sollicitation donnés. Malgré les précautions prises pour la relève des instantanés, il se peut, notamment dans le domaine des hautes températures que la méthode ne sorte que 3 modes avec les paramètres considérés. Afin de garder un nombre de modes constant, 4 modes sont systématiquement pris.

Si la relève des instantanées est faite de manière régulière indépendamment de la température, c'est-à-dire qu'un certain nombre d'instantanés sont pris régulièrement sur la plage de déformation considérée, il a été observé plusieurs choses. La première est la différence du nombre de modes obtenu pour un même critère dans le domaine des basses températures (6-7 modes) et dans le domaine des hautes températures (2 modes). Ce résultat découle de l'impact de la température sur la réponse

mécanique. Plus la température est élevée, plus la contrainte de croisement et la pente d'écrouissage sont faibles. En d'autre termes, plus la température est élevée, moins le coude est important, et plus le régime établi est atteint rapidement. Pour ce qui est des instantanés, dans le domaine des basses températures ceux ci seront présent en grand nombre dans le coude et légèrement dans le régime établi ce qui aboutit suite à l'application de la POD à un grand nombre de modes. Au contraire dans le domaine des hautes températures, l'ensemble des instantanés se trouvent dans le régime établi ce qui conduit à un faible nombre de modes et un coude relativement mal décrit.

C'est donc pour éviter tous ces inconvénients que la procédure précédente, à relève variable des instantanés, a été proposée. Elle permet de garder un nombre de modes relativement constant tout en améliorant la précision dans le coude du modèle NTFA.

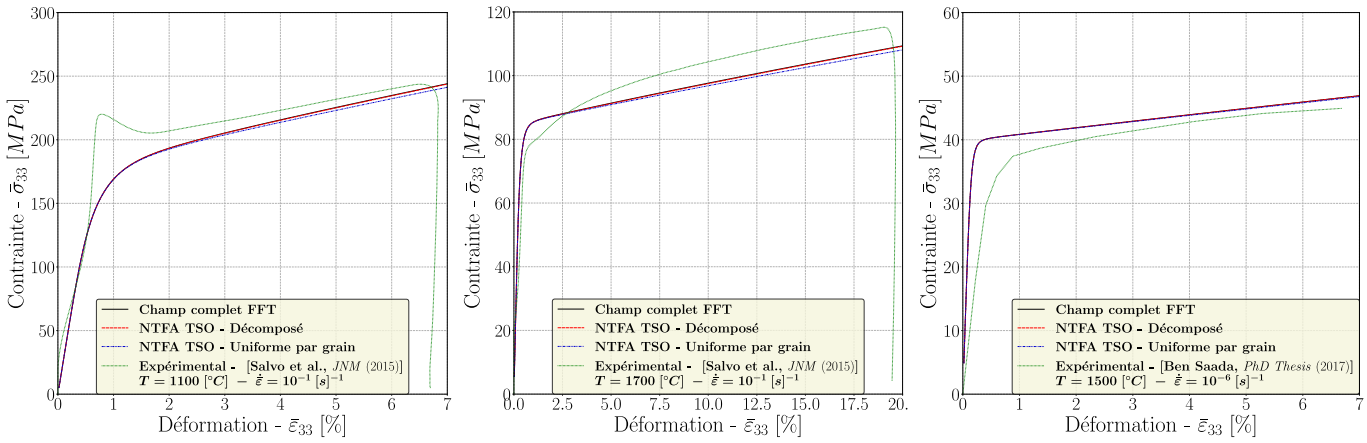
VI.2 Comparaison sur quelques essais de compression uniaxés des différents modèles vis-à-vis d'essais expérimentaux

La section suivante s'attache à étudier la bonne tenue et la précision du modèle d'ordre réduit NTFA TSO vis-à-vis de simulations numériques en champ complet. Pour ce faire trois cas de chargement sont retenus, chargements correspondant à des essais de compression uniaxés à vitesse de déformation imposée et pour différentes températures (les trois cas sont explicités dans la suite). La comparaison se fait à deux échelles, d'une part à l'échelle macroscopique et d'autre part à l'échelle locale où la distribution de la norme euclidienne des contraintes est utilisée.

Les réponses numériques issues d'une part d'une simulation en champ complet FFT et d'autre part du modèle d'ordre réduit NTFA TSO sont comparées aux résultats expérimentaux disponibles pour les mêmes conditions de chargement.

VI.2.1 Réponses effectives

Pour les trois cas de chargement, la contrainte macroscopique dans la direction de charge est prise fonction de la déformation macroscopique dans la même direction.



(a) $T = 1100$ $[°C]$, $\dot{\bar{\varepsilon}} = 10^{-1}$ $[s]^{-1}$. (b) $T = 1700$ $[°C]$, $\dot{\bar{\varepsilon}} = 10^{-1}$ $[s]^{-1}$. (c) $T = 1500$ $[°C]$, $\dot{\bar{\varepsilon}} = 10^{-6}$ $[s]^{-1}$.

FIGURE VI.2 – Contrainte $\bar{\sigma}_{33}$ en fonction de la déformation $\bar{\varepsilon}_{33}$. Comparaison entre les essais expérimentaux (vert), le modèle en champ complet FFT (noir), et le modèle d'ordre réduit NTFA TSO pour le cas décomposé (rouge) et uniforme par grain (bleu).

Les deux premiers cas étudiés (Fig. VI.2 :(a,b)[**Salvo 2014**]) concerne des conditions de chargement disponibles dans la littérature et se rapprochant des conditions d'un accident de type RIA. Ces deux cas permettent de tester la dépendance du modèle par rapport à la température. Le dernier cas

étudié (Fig. VI.2 :(c)[**Ben Saada 2017**]) permet de tester la dépendance du modèle vis-à-vis de la vitesse de déformation macroscopique et ce pour la fourchette la plus large disponible.

À l'échelle macroscopique, comme illustré Fig. VI.2, il y a un relativement bon accord entre d'une part les résultats expérimentaux [**Salvo 2014 ; Ben Saada 2017**] et d'autre par les résultats numériques issus des simulations en champ complet. L'illustration sur ces trois cas de chargement permet de confirmer la relative efficacité de la méthode d'identification inverse à retrouver les comportements asymptotiques obtenus sur les essais expérimentaux.

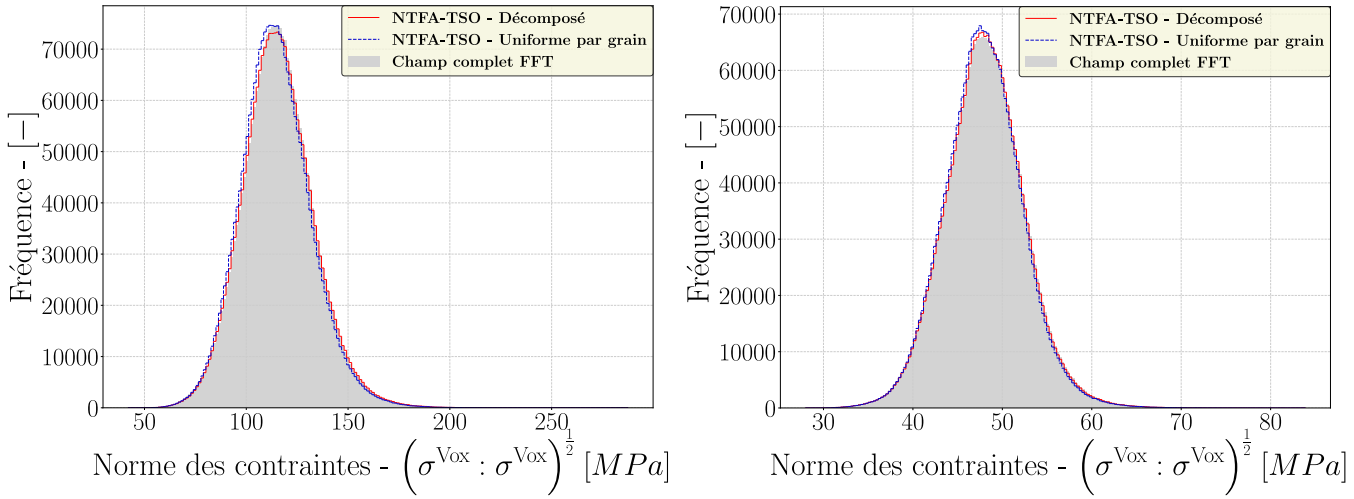
Pour ce qui est du modèle d'ordre réduit, il peut être vu Fig. VI.2 un très bon accord entre les résultats numériques issus des simulations en champ complet FFT et des simulations du modèle d'ordre réduit NTFA TSO et ce pour les trois cas de chargements étudiés. Il n'y a quasiment pas d'écart entre le modèle NTFA TSO où les variables sont décomposées et la réponse FFT.

Lorsque les variables d'écrouissage sont prises décomposées, les résultats sont systématiquement meilleurs que lorsque ces variables sont prises uniformes par grain. En particulier, la pente d'écrouissage asymptotique semble mieux décrite dans le cas décomposé. La différence entre les deux décompositions, même si elle augmente à mesure que la déformation augmente, reste malgré tout faible. Les deux cas donnent de très bons résultats.

VI.2.2 Réponses locales

Pour ce qui est des réponses locales seules deux conditions de chargement sont étudiées. En notant que l'écart entre le modèle d'ordre réduit NTFA TSO et le modèle en champ complet FFT est croissant lorsque la déformation macroscopique ($\bar{\varepsilon}_{33}$) augmente, seul l'instant final (qui est alors le pire des cas) de la simulation est étudié. La comparaison est faite entre le modèle en champ complet FFT et le modèle d'ordre réduit NTFA TSO et ce avec les différents cas étudiés (décomposé ou uniforme par grain).

Un des avantages du modèle d'ordre réduit NTFA est qu'il permet une reconstruction simple et directe des champs locaux. En effet, en s'appuyant sur Eq. V.17, le tenseur des contraintes ou des déformations ne sont que de simples combinaisons linéaires de champs préalablement calculés, champs qui sont pondérés par les variables d'état réduites (ξ_{vp}, $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$). En particulier, le champ des contraintes est reconstruit et l'histogramme de répartition de la norme euclidienne de ce champ défini aux voxels est comparé entre les deux approches.



(a) $T = 1700$ $[°C]$, $\dot{\bar{\varepsilon}} = 10^{-1}$ $[s]^{-1}$, $\bar{\varepsilon}_{33} = 20$ $[\%]$. (b) $T = 1500$ $[°C]$, $\dot{\bar{\varepsilon}} = 10^{-6}$ $[s]^{-1}$, $\bar{\varepsilon}_{33} = 7$ $[\%]$.

FIGURE VI.3 – Comparaison pour un essai d'écrouissage uniaxé des simulations issues du modèle en champ complet FFT (gris) et du modèle d'ordre réduit NTFA TSO pour le cas décomposé (rouge) et uniforme par grain (bleu). La distribution de la norme euclidienne du champ des contraintes pour différents chargements est utilisée.

Pour l'ensemble des conditions de chargement, la distribution obtenue par le modèle d'ordre réduit NTFA, est en bon accord avec celui obtenu par le modèle en champ complet FFT (voir Fig. VI.3). L'écart entre les deux décompositions, noté à l'échelle macroscopique, est perceptible à mesure que la déformation totale augmente.

Sur un VER constitué de 500 grains et comprenant 135^3 voxels, une différence notable en terme de temps de calcul est observée entre les simulations issues du modèle en champs complet et celles issues du modèle d'ordre réduit NTFA TSO pour les cas décomposé et uniforme par grain. Pour ce qui est du rapport des temps de simulations entre le modèle en champ complet (FFT) et le modèle NTFA TSO cas uniforme par grain (Uni), celui-ci est de l'ordre de $\frac{\text{FFT}}{\text{Uni}} \sim 756\,[-]$, très largement en faveur du modèle d'ordre réduit NTFA TSO cas uniforme par grain. Il y a environ 3 ordres de grandeur entre les deux approches. Un écart est également noté entre les temps de simulations issues du modèle NTFA TSO cas décomposé (Dec) et celles issues du cas uniforme par grain. Ce rapport est de l'ordre de $\frac{\text{Dec}}{\text{Uni}} \sim 1.8\,[-]$, en faveur du modèle NTFA TSO cas uniforme par grain qui est plus rapide, d'un facteur proche de 2, que le modèle NTFA TSO cas décomposé.

En conclusion le modèle d'ordre réduit est tout aussi efficace et précis à l'échelle locale qu'à l'échelle macroscopique pour un cas de chargement uniaxé.

VI.3 Comparaison sur quelques essais triaxés des modèles FFT et NTFA TSO

La section suivante s'attache à étudier la précision du modèle d'ordre réduit NTFA-TSO vis-à-vis des simulations numériques en champ complet lorsque l'axe de chargement n'est plus uniaxé mais triaxé quelconque. Les cas de chargement correspondent à des essais triaxés à vitesse de déformation imposée et pour différentes températures. À nouveau, la comparaison est faite aux deux échelles, macroscopique et locale.

Les réponses numériques issues d'une part d'une simulation en champ complet FFT et d'autre part du modèle d'ordre réduit NTFA TSO sont comparées pour les mêmes conditions de chargement.

L'ensemble des simulations est conduite à une seule vitesse de déformation dite de référence $\dot{\bar{\varepsilon}}_0 = 10^{-1}\ [s]^{-1}$. Trois températures sont retenues $T = \{1000,\ 1800,\ 2600\}\,[°C]$. Elles permettent de tester les extrêmes avec ou sans écrouissage ainsi qu'une température intermédiaire.

VI.3.1 Construction de la base de modes pour un chargement triaxé

Comme précédemment un algorithme piloté en déformation et à direction de contrainte imposée est utilisée. On considère un chargement triaxé quelconque de la forme $\Sigma_0 = [a\ b\ c\ 0\ 0\ 0]$ où Σ_0 est la direction de contrainte imposée (direction de chargement) notée avec la convention de Kelvin et (a, b, c) des coefficients quelconques. La triaxialité des contraintes est définie par le rapport : $X(\sigma) = \frac{\sigma_{\text{m}}^0}{\sigma_{\text{eq}}^0}$.

Trois chargements élémentaires sont considérés, à savoir $\Sigma_0^{11} = [1\ 0\ 0\ 0\ 0\ 0]$, $\Sigma_0^{22} = [0\ 1\ 0\ 0\ 0\ 0]$ et $\Sigma_0^{33} = [0\ 0\ 1\ 0\ 0\ 0]$ desquels sont déduites les familles de modes dites élémentaires $\{\boldsymbol{\mu}_{\text{vp}}^{\mathbf{11}}\}$, $\{\boldsymbol{\mu}_{\text{vp}}^{\mathbf{22}}\}$ et $\{\boldsymbol{\mu}_{\text{vp}}^{\mathbf{33}}\}$.

De ces familles élémentaires, la base de modes considérée pour le chargement triaxé est une concaténation des familles élémentaires à savoir $\{\boldsymbol{\mu}_{\text{vp}}\} = \{\{\boldsymbol{\mu}_{\text{vp}}^{\mathbf{11}}\}, \{\boldsymbol{\mu}_{\text{vp}}^{\mathbf{22}}\}, \{\boldsymbol{\mu}_{\text{vp}}^{\mathbf{33}}\}\}$. L'avantage principal de ce type de construction est qu'il est possible de connaitre l'importance de chacun des modes en fonction de l'axe de chargement retenu. En d'autres termes, le fait de ne pas faire de POD sur la base de modes retenues (de ne pas les mélanger), il devient possible en s'appuyant sur l'évolution des variables réduites ξ_{vp}, de connaitre la part de chacun des modes dans la réponse mécanique.

Il est à remarquer que la base de modes ainsi construite n'est plus orthogonale. La propriété de l'orthogonalité n'intervient pas dans le modèle c'est pourquoi ce n'est pas un problème ici. Néanmoins, s'il fallait une base modale orthogonale, il aurait fallu, par nécessité, orthogonaliser la base modale par la POD par exemple ce qui conduirait à un mélange des modes considérés.

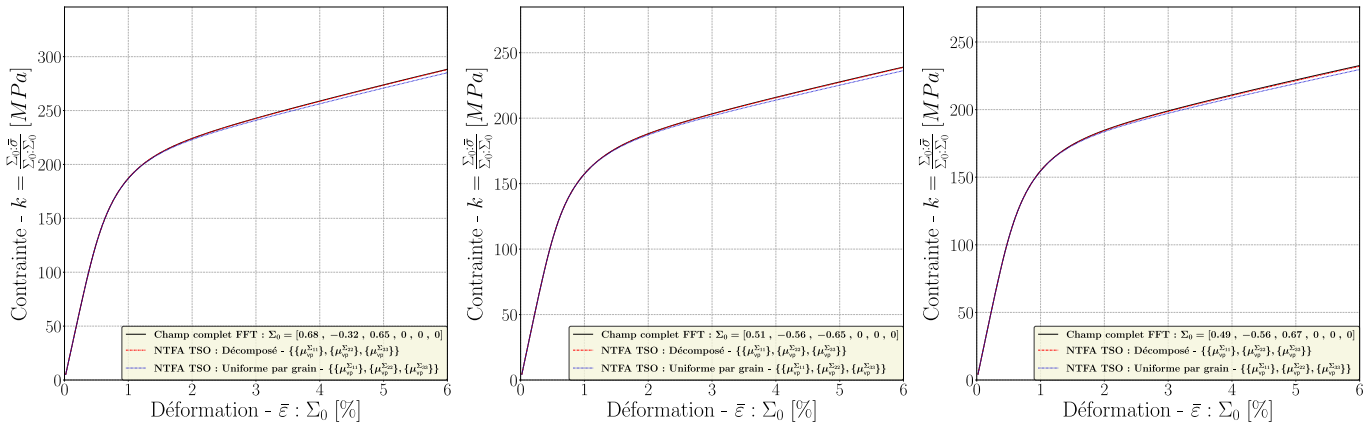
Un travail similaire est effectué sur les modes qui concernent les variables d'écrouissage (p_i).

Il est à noter que la famille de modes considérée à une condition de sollicitation donnée est utilisé pour l'ensemble des chargements triaxés. En d'autres termes, la famille de modes ne dépend pas de la direction de sollicitation envisagée tant que celle-ci reste triaxée.

VI.3.2 Réponses effectives

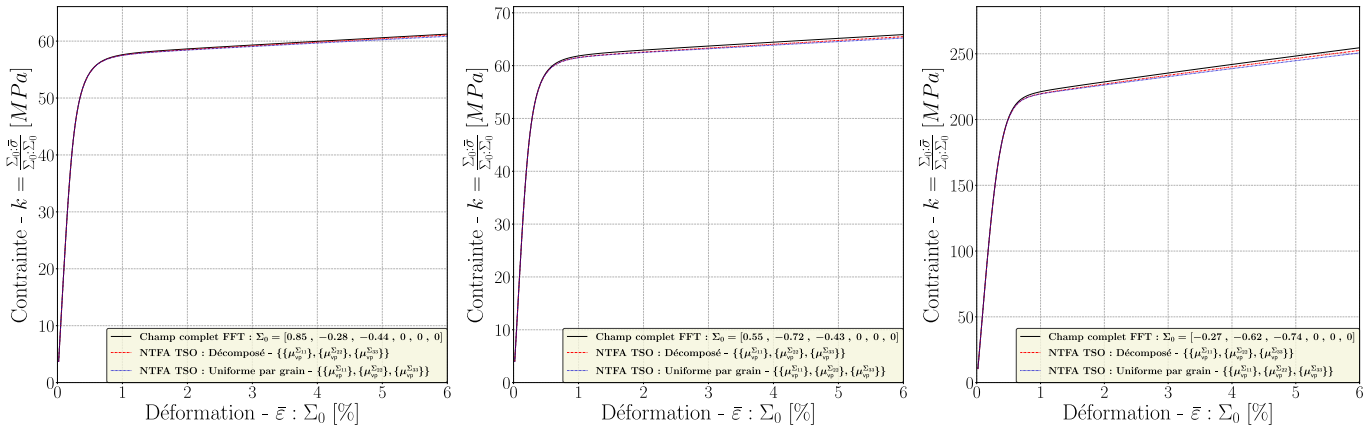
Pour trois cas de chargement, le niveau de contrainte défini par le rapport $k = \frac{\Sigma_0 : \bar{\sigma}}{\Sigma_0 : \Sigma_0}$ est montré en fonction de la déformation projetée $\bar{\varepsilon} : \Sigma_0$, où Σ_0 est la direction de contrainte, $\bar{\sigma}$ la contrainte moyenne, $\bar{\varepsilon}$ la déformation moyenne.

Pour ces trois cas de chargement à savoir $T = \{1000,\ 1800,\ 2600\}$ $[°C]$, $\dot{\bar{\varepsilon}} = 10^{-1}$ $[s]^{-1}$, trois directions déterminées aléatoirement sont testées.



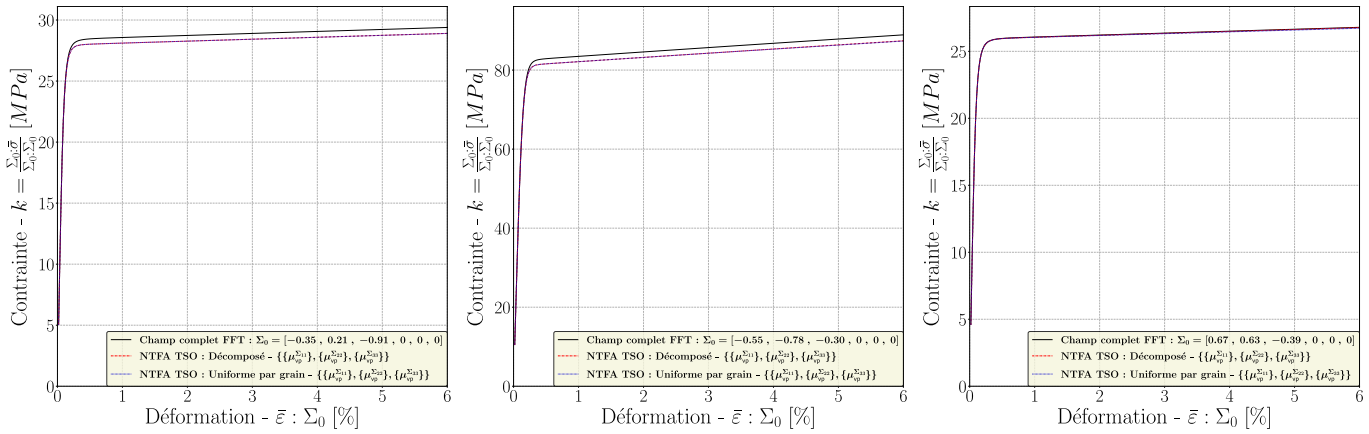
(a) $\Sigma_0 = [.68, -.32, .65]$, $X = 0.34$. (b) $\Sigma_0 = [.51, -.56, -.65]$, $X = -0.21$. (c) $\Sigma_0 = [.49, -.56, -.67]$, $X = -0.22$.

FIGURE VI.4 – Conditions de chargement définies par $T = 1000$ $[°C]$, $\dot{\bar{\varepsilon}} = 10^{-1}$ $[s]^{-1}$. Niveau de contrainte $k = \frac{\Sigma_0 : \bar{\sigma}}{\Sigma_0 : \Sigma_0}$ en fonction de la déformation projetée $\bar{\varepsilon} : \Sigma_0$, avec Σ_0 la direction de contrainte.



(a) $\Sigma_0 = [.85, -.28, -.44]$, $X = 0.035$. (b) $\Sigma_0 = [.55, -.72, -.43]$, $X = -0.17$. (c) $\Sigma_0 = -[.27, .62, .74]$, $X = -1.3$.

FIGURE VI.5 – Conditions de chargement définies par $T = 1800$ $[°C]$, $\dot{\bar{\varepsilon}} = 10^{-1}$ $[s]^{-1}$. Niveau de contrainte $k = \frac{\Sigma_0 : \bar{\sigma}}{\Sigma_0 : \Sigma_0}$ en fonction de la déformation projetée $\bar{\varepsilon} : \Sigma_0$, avec Σ_0 la direction de contrainte.



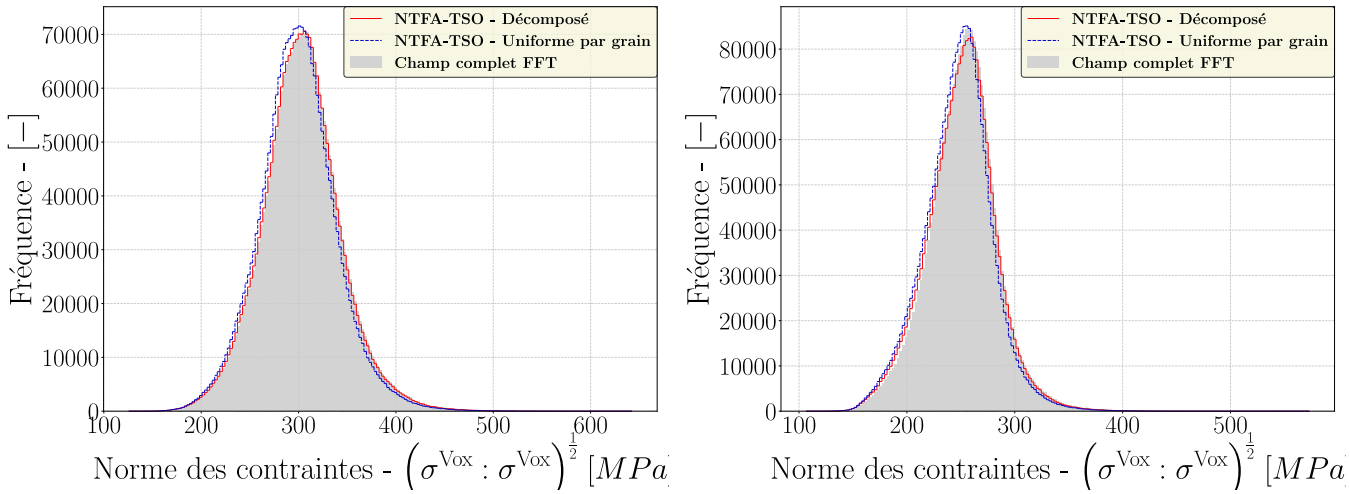
(a) $\Sigma_0 = [-.35, .21, -.91]$, $X = -0.36$. (b) $\Sigma_0 = -[.55, .78, .30]$, $X = -1.3$. (c) $\Sigma_0 = [.67, .63, -.39]$, $X = 0.29$.

FIGURE VI.6 – Conditions de chargement définies par $T = 2600\ [°C]$, $\dot{\bar{\varepsilon}} = 10^{-1}\ [s]^{-1}$. Niveau de contrainte $k = \frac{\Sigma_0:\bar{\sigma}}{\Sigma_0:\Sigma_0}$ en fonction de la déformation projetée $\bar{\varepsilon} : \Sigma_0$, avec Σ_0 la direction de contrainte.

À l'échelle macroscopique, comme illustré Fig. VI.4, Fig. VI.5 et Fig. VI.6, il y a un très bon accord entre les résultats numériques issus des simulations en champ complet FFT et ceux issus des simulations du modèle d'ordre réduit NTFA TSO et ce pour les trois cas de chargement ainsi que les triaxialités étudiées. Il n'y a quasiment pas d'écart entre le modèle NTFA TSO où les variables sont décomposées et la réponse FFT.

Lorsque la variable d'écrouissage est prise décomposée, les résultats sont meilleurs que lorsque cette variable est prise uniforme par grain. En particulier, la pente d'écrouissage asymptotique semble mieux décrite dans le cas décomposé. La différence entre les deux décompositions, même si elle augmente à mesure que la déformation augmente, reste malgré tout faible. Les deux cas donnent de très bons résultats.

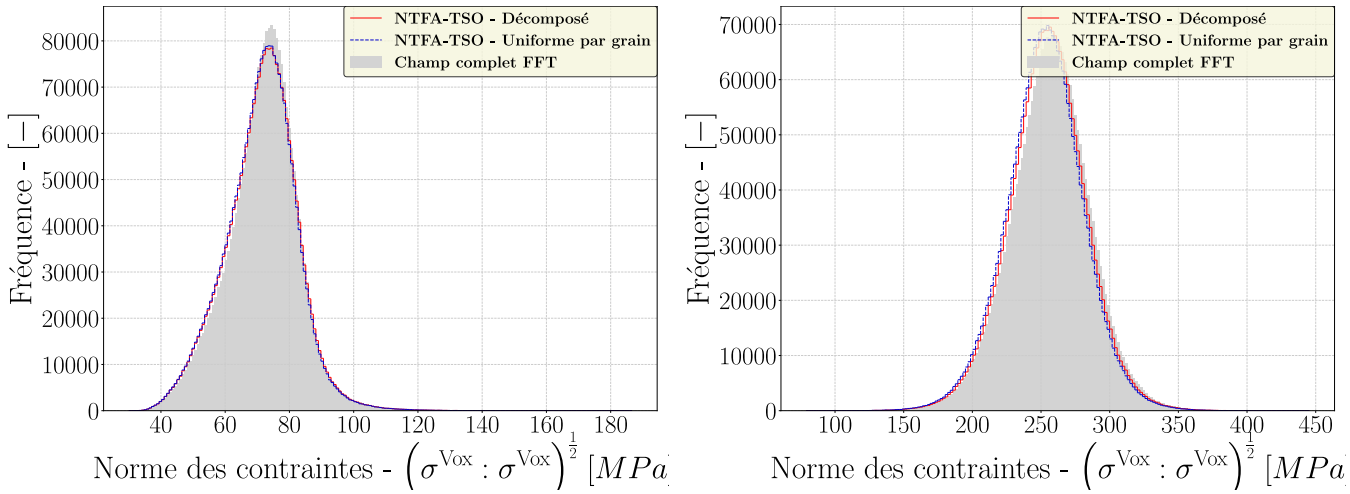
VI.3.3 Réponses locales



(a) $\Sigma_0 = [0.68, -0.32, 0.65, 0, 0, 0]$, $X = 0.34$. (b) $\Sigma_0 = [0.49, -0.56, -0.67, 0, 0, 0]$, $X = -0.22$.

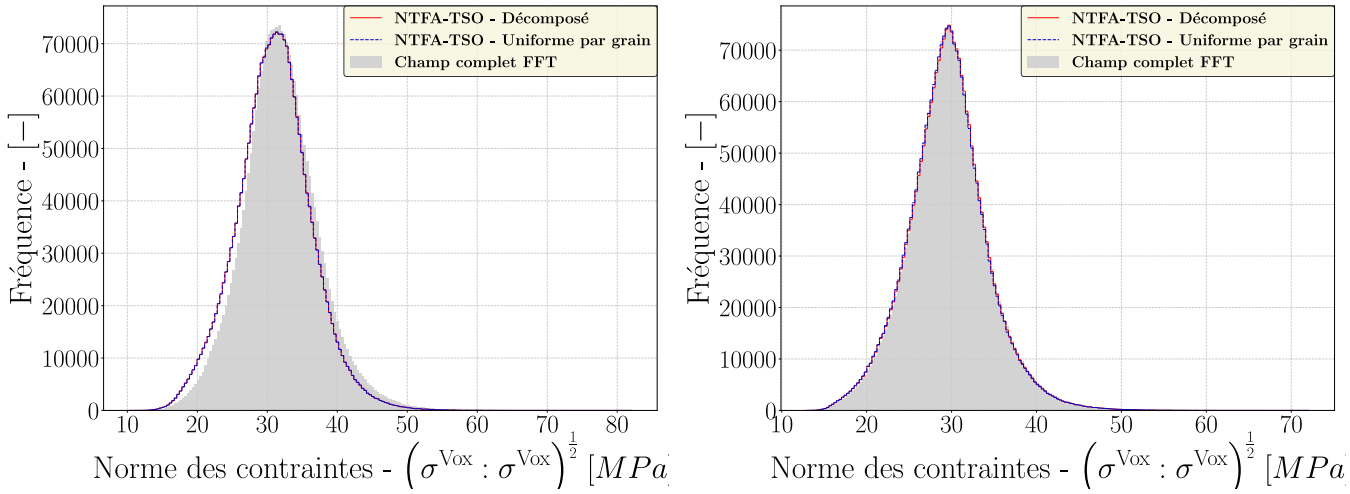
FIGURE VI.7 – Conditions de chargement définies par $T = 1000\ [°C]$, $\dot{\bar{\varepsilon}} = 10^{-1}\ [s]^{-1}$, $\bar{\varepsilon} : \Sigma_0 = 6\ [\%]$. Comparaison pour un essai d'écrouissage triaxé des simulations issues du modèle en champ complet FFT (gris) et du modèle d'ordre réduit NTFA TSO pour le cas décomposé (rouge) et uniforme par grain (bleu). La distribution de la norme euclidienne des contraintes locales pour différents chargements est utilisée.

Pour ce qui est de la réponse locale, deux directions de chargement sont étudiées. En notant que l'écart entre le modèle d'ordre réduit NTFA TSO et le modèle en champ complet FFT est croissant lorsque la déformation macroscopique augmente, seul l'instant final (qui est alors le pire des cas) de la simulation est étudié. La comparaison est faite entre le modèle en champ complet FFT et le modèle d'ordre réduit NTFA TSO et ce pour les différents cas étudiés (décomposé ou uniforme par grain).



(a) $\Sigma_0 = [0.85, -0.28, -0.44, 0, 0, 0],\ X = 0.035.$ (b) $\Sigma_0 = [-0.27, -0.62, -0.74, 0, 0, 0],\ X = -1.28.$

FIGURE VI.8 – Conditions de chargement définies par $T = 1800\ [°C],\ \dot{\bar{\varepsilon}} = 10^{-1}\ [s]^{-1},\ \bar{\varepsilon} : \Sigma_0 = 6\ [\%]$. Comparaison pour un essai d'écrouissage triaxé des simulations issues du modèle en champ complet FFT (gris) et du modèle d'ordre réduit NTFA TSO pour le cas décomposé (rouge) et uniforme par grain (bleu). La distribution de la norme euclidienne des contraintes locales pour différents chargements est utilisée.



(a) $\Sigma_0 = [-0.35, 0.21, -0.91, 0, 0, 0],\ X = -0.36.$ (b) $\Sigma_0 = [0.67, 0.63, -0.39, 0, 0, 0],\ X = 0.29.$

FIGURE VI.9 – Conditions de chargement définies par $T = 2600\ [°C],\ \dot{\bar{\varepsilon}} = 10^{-1}\ [s]^{-1},\ \bar{\varepsilon} : \Sigma_0 = 6\ [\%]$. Comparaison pour un essai d'écrouissage triaxé des simulations issues du modèle en champ complet FFT (gris) et du modèle d'ordre réduit NTFA TSO pour le cas décomposé (rouge) et uniforme par grain (bleu). La distribution de la norme euclidienne des contraintes locales pour différents chargements est utilisée.

Toujours en s'appuyant sur Eq. V.17, les contraintes ou les déformations locales ne sont que de simples combinaisons linéaires de champs préalablement calculés, champs qui sont pondérés par

les variables internes réduites (ξ_{vp}, $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$). En particulier, les contraintes locales sont reconstruites et l'histogramme de répartition de la norme euclidienne de ces contraintes est comparée entre les deux approches.

Pour l'ensemble des conditions de chargement, la distribution obtenue par le modèle d'ordre réduit NTFA, est en bon accord avec celui obtenu par le modèle en champ complet (voir Fig. VI.7,Fig. VI.8, Fig. VI.9). L'écart entre les deux décompositions est peu perceptible ici.

En conclusion le modèle d'ordre réduit est tout aussi efficace et précis à l'échelle locale qu'à l'échelle macroscopique pour un cas de chargement triaxé.

VI.4 Comparaison sur quelques essais de sollicitation avec un chargement quelconque des modèles FFT et NTFA TSO

La section suivante s'attache à étudier la bonne tenue et la précision du modèle d'ordre réduit NTFA TSO vis-à-vis de simulations numériques en champ complet lorsque l'axe de chargement est maintenant pris quelconque. Les cas de chargement correspondent à des essais à vitesse de déformation imposée et pour différentes températures. La comparaison se fait à deux échelles, d'une part à l'échelle macroscopique et d'autre part à l'échelle locale où la distribution de la norme euclidienne des contraintes est utilisée.

Les réponses numériques issues d'une part d'une simulation en champ complet FFT et d'autre part du modèle d'ordre réduit NTFA TSO sont comparées pour les mêmes conditions de chargement.

L'ensemble des simulations est conduite à une seule vitesse de déformation dite de référence $\dot{\bar{\varepsilon}}_0 = 10^{-1}\ [s]^{-1}$. Trois températures sont retenues $T = \{1000,\ 1800,\ 2600\}\ [^\circ C]$. Elles permettent de tester les extrêmes avec ou sans écrouissage ainsi qu'une température intermédiaire.

VI.4.1 Construction de la base de modes pour un chargement quelconque

Comme précédemment un algorithme piloté en déformation et à direction de contrainte imposée est utilisée. On considère un chargement quelconque de la forme $\Sigma_0 = [a\ b\ c\ d\ e\ f]$ où Σ_0 est la direction de contrainte imposée (direction de chargement) notée avec la convention de Kelvin et (a, b, c, d, e, f) des coefficients quelconques.

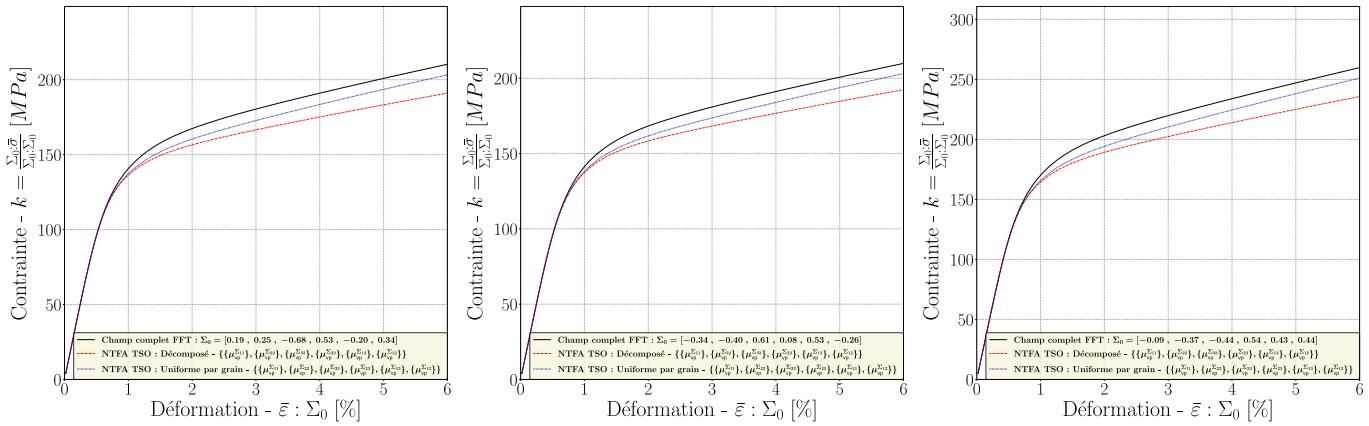
En s'inspirant du chargement triaxé, six chargements élémentaires sont considérés, les trois premiers issus du chargement triaxé ($\Sigma_0^{11}, \Sigma_0^{22}, \Sigma_0^{33}$) en y ajoutant les directions de cisaillement à savoir $\Sigma_0^{23} = [0\ 0\ 0\ 1\ 0\ 0]$, $\Sigma_0^{13} = [0\ 0\ 0\ 0\ 1\ 0]$ et $\Sigma_0^{12} = [0\ 0\ 0\ 0\ 0\ 1]$. De ces six familles sont déduites les familles de modes élémentaires $\{\boldsymbol{\mu}_{\mathsf{vp}}^{\mathbf{11}}\}$, $\{\boldsymbol{\mu}_{\mathsf{vp}}^{\mathbf{22}}\}$, $\{\boldsymbol{\mu}_{\mathsf{vp}}^{\mathbf{33}}\}$, $\{\boldsymbol{\mu}_{\mathsf{vp}}^{\mathbf{23}}\}$, $\{\boldsymbol{\mu}_{\mathsf{vp}}^{\mathbf{13}}\}$, $\{\boldsymbol{\mu}_{\mathsf{vp}}^{\mathbf{12}}\}$.

De ces familles élémentaires, la base de modes considérés pour le chargement quelconque est une concaténation des familles élémentaires à savoir $\{\boldsymbol{\mu}_{\mathsf{vp}}\} = \{\{\boldsymbol{\mu}_{\mathsf{vp}}^{\mathbf{11}}\}, \{\boldsymbol{\mu}_{\mathsf{vp}}^{\mathbf{22}}\}, \{\boldsymbol{\mu}_{\mathsf{vp}}^{\mathbf{33}}\}, \{\boldsymbol{\mu}_{\mathsf{vp}}^{\mathbf{23}}\}, \{\boldsymbol{\mu}_{\mathsf{vp}}^{\mathbf{13}}\}, \{\boldsymbol{\mu}_{\mathsf{vp}}^{\mathbf{12}}\}\}$. Un travail similaire est effectué sur les modes qui concernent les variables d'écrouissage (p_{i}).

VI.4.2 Réponses effectives

Pour trois cas de chargement, le niveau de contrainte $k = \frac{\Sigma_0 : \bar{\sigma}}{\Sigma_0 : \Sigma_0}$ est montré en fonction de la déformation projetée $\bar{\varepsilon} : \Sigma_0$, où Σ_0 est la direction de contrainte, $\bar{\sigma}$ est la contrainte moyenne, $\bar{\varepsilon}$ est la déformation moyenne.

Pour ces trois cas de chargement à savoir $T = \{1000,\ 1800,\ 2600\}\ [^\circ C]$, $\dot{\bar{\varepsilon}} = 10^{-1}\ [s]^{-1}$, trois directions déterminées aléatoirement sont testées.

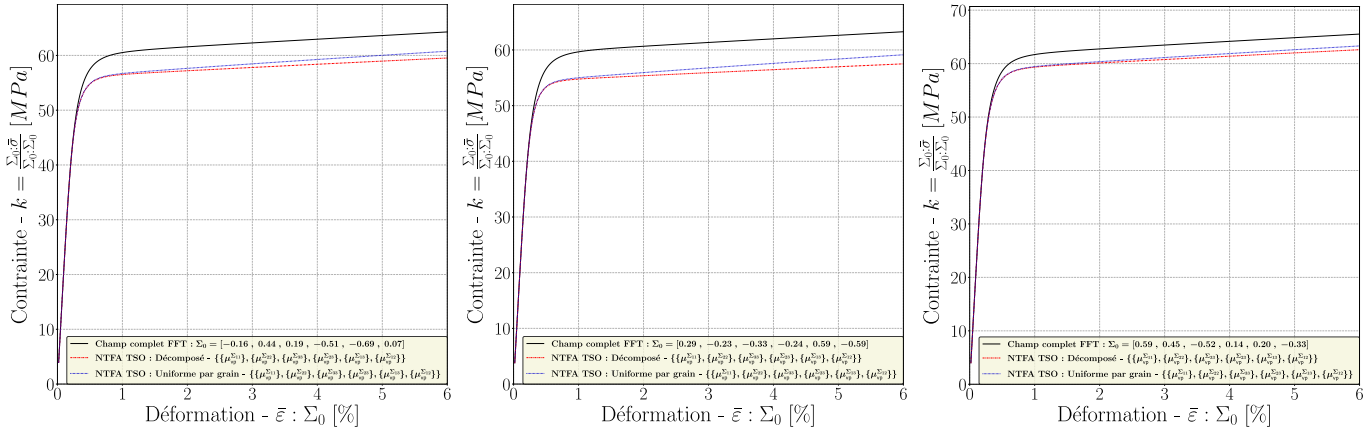


(a) $\Sigma_0 = [.19, .25, -.68, .53, -.2, .34]$
$X = -0.06$.

(b) $\Sigma_0 = [-.34, -.4, .61, .08, .53, -.26]$
$X = -0.04$.

(c) $\Sigma_0 = [-.09, -.37, -.44, .54, .43, .44]$
$X = -0.28$.

FIGURE VI.10 – Conditions de chargement définies par $T = 1000\ [°C]$, $\dot{\bar{\varepsilon}} = 10^{-1}\ [s]^{-1}$. Niveau de contrainte $k = \frac{\Sigma_0:\bar{\sigma}}{\Sigma_0:\Sigma_0}$ en fonction de la déformation projetée $\bar{\varepsilon} : \Sigma_0$.

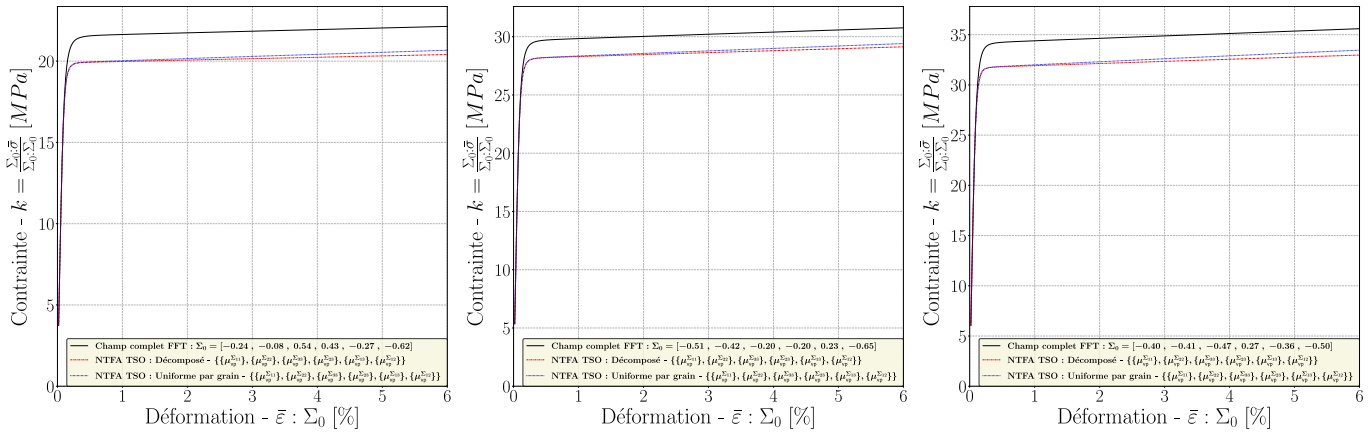


(a) $\Sigma_0 = [-.16, .44, .19, -.51, -.69, .07]$
$X = 0.13$.

(b) $\Sigma_0 = [.29, -.23, -.33, -.24, .6, -.6]$
$X = -0.07$.

(c) $\Sigma_0 = [.59, .45, -.52, .14, .2, -.33]$
$X = 0.15$.

FIGURE VI.11 – Conditions de chargement définies par $T = 1800\ [°C]$, $\dot{\bar{\varepsilon}} = 10^{-1}\ [s]^{-1}$. Niveau de contrainte $k = \frac{\Sigma_0:\bar{\sigma}}{\Sigma_0:\Sigma_0}$ en fonction de la déformation projetée $\bar{\varepsilon} : \Sigma_0$.



(a) $\Sigma_0 = -[.24, .08, -.54, -.43, .27, .62]$
$X = 0.06$.

(b) $\Sigma_0 = -[.51, .42, .2, .2, -.23, .65]$
$X = -0.4$.

(c) $\Sigma_0 = -[.4, .41, .47, -.27, .36, .5]$
$X = -0.5$.

FIGURE VI.12 – Conditions de chargement définies par $T = 2600\ [°C]$, $\dot{\bar{\varepsilon}} = 10^{-1}\ [s]^{-1}$. Niveau de contrainte $k = \frac{\Sigma_0:\bar{\sigma}}{\Sigma_0:\Sigma_0}$ en fonction de la déformation projetée $\bar{\varepsilon} : \Sigma_0$.

À l'échelle macroscopique, comme illustré Fig. VI.10, Fig. VI.11 et Fig. VI.12, il y a un écart qui est croissant en fonction de la déformation entre les résultats numériques issus des simulations en champ complet FFT et ceux issus des simulations du modèle d'ordre réduit NTFA TSO. En particulier, le cas décomposé est systématiquement moins bon que le cas uniforme par grain. Aussi étonnant que cela puisse paraître, la pente d'écrouissage est mieux prise en compte dans le cas uniforme par grain. De plus, pour les fortes températures, il est à relever un écart important en termes de contrainte d'entrée en viscoplasticité.

Les raisons qui expliqueraient que le cas décomposé est moins bon que le cas uniforme par grain ne sont pas claires.

Néanmoins il est possible d'avancer quelques pistes de réflexion. Il est à remarquer que la réponse du cas uniforme par grain est plutôt bonne. En effet, il est certes observé un écart en terme de contrainte d'entrée en viscoplasticité mais la pente d'écrouissage semble être tout aussi bien prise en compte que lorsque l'axe de chargement est pris triaxé. Ceci pourrait laisser à penser que la base modale considérée est suffisamment complète (au moins pour décrire l'état asymptotique). Néanmoins, le cas décomposé se comporte moins bien, alors que pour les autres cas de chargement (triaxé, uniaxé), le cas décomposé est systématiquement meilleur que le cas uniforme par grain. Deux pistes de réflexion semblerait à privilégier. La première est de remarquer que dans le cas d'un chargement quelconque, la base de modes retenue dans le modèle commence à être relativement conséquente. Il pourrait être envisagé que le modèle, dans le cas décomposé, ne s'en sorte pas lorsqu'il y a trop de modes. Pour le dire plus clairement, il y a un certain nombres de coefficients qui interviennent dans la loi d'évolution des variables thermodynamiques réduites (cf. Eq. V.16) et peut-être qu'à partir d'un certain nombre de modes le modèle ne s'y retrouve plus. La deuxième, à l'opposer de la première réflexion, consiste à dire que la base de modes issue d'une concaténation des bases modales obtenues via des chargements élémentaires ne suffit pas à couvrir un chargement quelconque. Il faudrait éventuellement enrichir la base de modes.

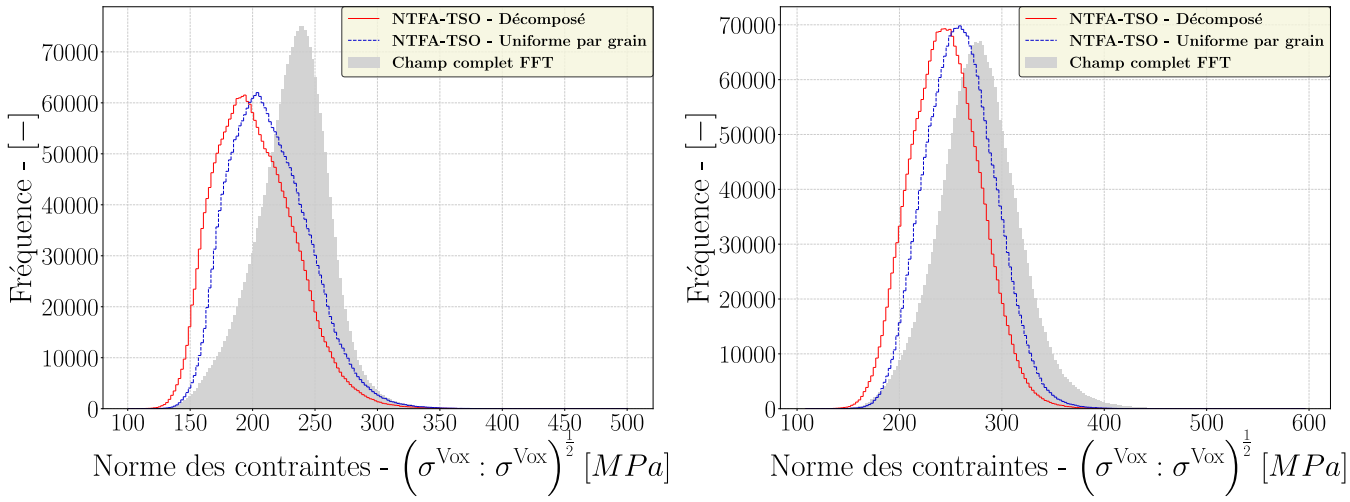
VI.4.3 Réponses locales

Pour ce qui est de la réponse locale deux directions de chargement sont étudiées. En notant que l'écart entre le modèle d'ordre réduit NTFA TSO et le modèle à champ complet FFT est croissant lorsque la déformation macroscopique augmente, seul le temps final (qui est alors le pire des cas) de la simulation est étudié. La comparaison est faite entre le modèle en champ complet FFT et le modèle d'ordre réduit NTFA TSO et ce avec les différents cas étudiés (décomposé ou uniforme par grain).

Pour l'ensemble des conditions de chargement, il est observé un écart entre la distribution obtenue par le modèle d'ordre réduit NTFA et celle obtenue par le modèle en champ complet FFT (voir Fig. VI.13, Fig. VI.14 et Fig. VI.15). L'écart entre les deux décompositions est d'avantage perceptible sur Fig. VI.13 lorsque l'écrouissage est important. Ceci n'a pas été observé jusqu'à présent dans les autres essais menés (uniaxé, triaxé). L'écart entre la distribution du modèle d'ordre réduit et celle issue du modèle à champ complet n'est pas vraiment une surprise dans le sens où déjà à l'échelle macroscopique, il est noté un écart relativement important entre les deux modèles. Ici la différence de distribution ne fait qu'illustrer cet écart.

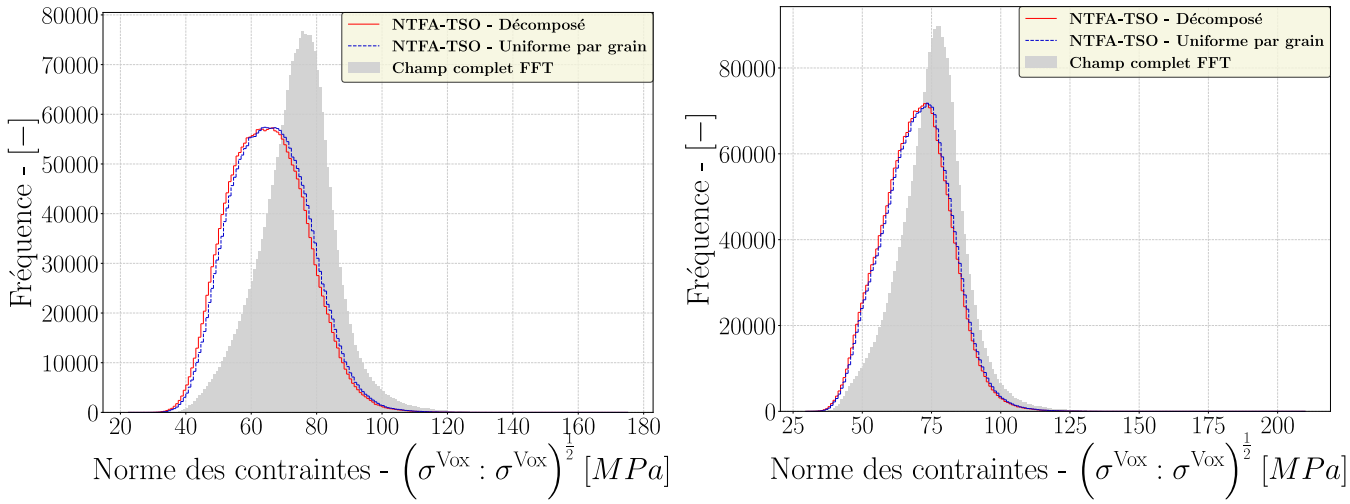
Les résultats, quoique pas totalement hors sujet pour le cas NTFA TSO uniforme par grain, laissent apparaître quelques faiblesses dans l'approche retenue. À la différence d'un chargement triaxé, aussi bien à l'échelle locale que macroscopique, les résultats présentent des écarts avec le modèle en champ complet, modèle pris comme référence. Si les modes avaient été identifiés sur le trajet de chargement, un accord similaire au cas uniaxé serait obtenu entre les résultats issus du modèle d'ordre réduit NTFA TSO et ceux issus du modèle en champ complet.

Ceci laisse à penser que ce n'est pas le modèle NTFA TSO qui est mis en défaut ici. La construction de la base modale envisagée en première approche, approche issue des travaux de [**Largenton et al. 2014**] dans un cas de viscoélasticité linéaire, consiste à considérer la base modale comme une



(a) $\Sigma_0 = [.19, .25, -.68, .53, -.2, .34],\ X = -0.06.$ (b) $\Sigma_0 = [-.09, -.37, -.44, .54, .43, .44],\ X = -0.28.$

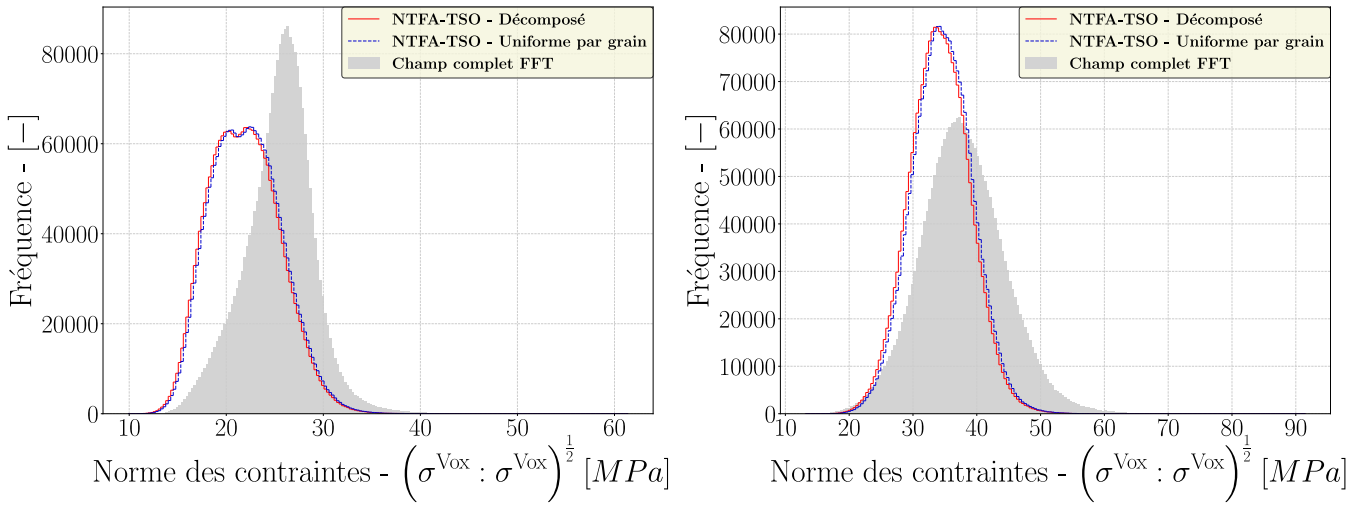
FIGURE VI.13 – Conditions de chargement définies par $T = 1000\ [°C],\ \dot{\bar{\varepsilon}} = 10^{-1}\ [s]^{-1},\ \bar{\varepsilon} : \Sigma_0 = 6\ [\%]$. Comparaison pour un essai d'écrouissage quelconque des simulations issues du modèle en champ complet FFT (gris) et du modèle d'ordre réduit NTFA TSO pour le cas décomposé (rouge) et uniforme par grain (bleu). La distribution de la norme euclidienne des contraintes locales pour différents chargements est utilisée.



(a) $\Sigma_0 = [-.16, .44, .19, -.51, -.69, .07],\ X = 0.13.$ (b) $\Sigma_0 = [.59, .45, -.52, .14, .2, -.33],\ X = 0.15.$

FIGURE VI.14 – Conditions de chargement définies par $T = 1800\ [°C],\ \dot{\bar{\varepsilon}} = 10^{-1}\ [s]^{-1},\ \bar{\varepsilon} : \Sigma_0 = 6\ [\%]$. Comparaison pour un essai d'écrouissage quelconque des simulations issues du modèle en champ complet FFT (gris) et du modèle d'ordre réduit NTFA TSO pour le cas décomposé (rouge) et uniforme par grain (bleu). La distribution de la norme euclidienne des contraintes locales pour différents chargements est utilisée.

concaténation des bases modales issues des chargements élémentaires. Cette manière de construction est mise en défaut dans le cas présent et mériterait donc d'être améliorée.



(a) $\Sigma_0 = [-.24, -.08, .54, .43, -.27, -.62],\ X = 0.06.$ (b) $\Sigma_0 = [-.4, -.41, -.47, .27, -.36, -.5],\ X = -0.5.$

FIGURE VI.15 – Conditions de chargement définies par $T = 2600\ [°C],\ \dot{\bar{\varepsilon}} = 10^{-1}\ [s]^{-1},\ \bar{\varepsilon} : \Sigma_0 = 6\ [\%]$. Comparaison pour un essai d'écrouissage quelconque des simulations issues du modèle en champ complet FFT (gris) et du modèle d'ordre réduit NTFA TSO pour le cas décomposé (rouge) et uniforme par grain (bleu). La distribution de la norme euclidienne des contraintes locales pour différents chargements est utilisée.

Chapitre VII

Prise en compte des conditions de chargement dans le modèle d'ordre réduit

L'objectif de cette partie est de couvrir l'ensemble des cas de sollicitations en température et vitesse de déformation macroscopique $(T, \dot{\bar{\varepsilon}})$ tout en gardant un nombre aussi faible que possible de variables réduites.

Dans un premier temps, la dépendance à la température est traitée. Dans ce cas, les modes sont pris fonction de la température via l'utilisation de la méthode d'interpolation de Lagrange.

Dans un deuxième temps, la dépendance à la vitesse de déformation est intégrée en cherchant à utiliser la même base de modes déterminée à la vitesse de référence et aux températures de référence $(T_0, \dot{\bar{\varepsilon}}_0)$ à un autre couple de température et vitesse $(T, \dot{\bar{\varepsilon}})$. Le couple $(T, \dot{\bar{\varepsilon}})$ est lié à un couple $(T_0, \dot{\bar{\varepsilon}}_0)$ via l'introduction et l'utilisation d'un chemin.

Enfin, en utilisant ces deux approximations, les simulations numériques issues du modèle d'ordre réduit NTFA TSO sont comparées à celles issues du modèle en champ complet pour différents cas de chargement. Deux cas de chargement sont retenus. Le premier est le cas d'un chargement uniaxé, le deuxième est la cas d'un chargement triaxé aléatoire. Ces deux cas de chargement correspondent à des essais à vitesse de déformation imposée et pour différentes températures. Comme précédemment, la comparaison se fait aux deux échelles (échelle macroscopique et échelle locale) à l'aide de l'algorithme à direction de contrainte imposée.

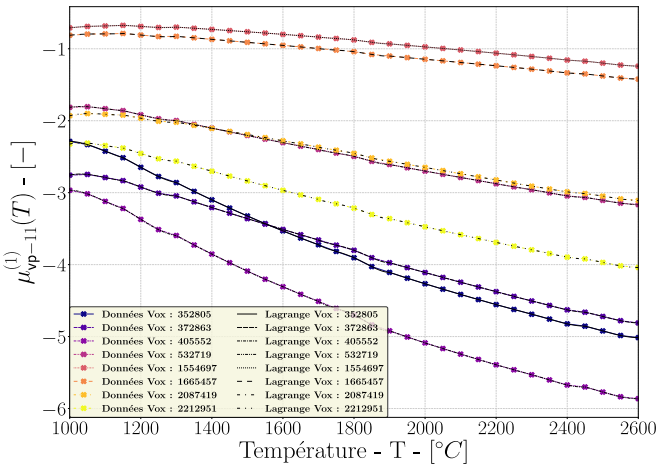
VII.1 Prise en compte de la température

Dans cette section, la vitesse de déformation macroscopique est prise constante et est définie comme la vitesse de référence $\dot{\bar{\varepsilon}}_0 = 10^{-1}\ [s]^{-1}$. L'objectif est d'avoir un modèle d'ordre réduit, ici NTFA TSO, qui soit valide sur l'ensemble du domaine des températures de référence $T_0 \in [1000,\ 2600]\ [°C]$ à la vitesse de référence considérée. Le modèle doit être capable d'intégrer une variation continue de la température, ce qui induit qu'il y ait un nombre de modes constant lorsque la température varie. Le fait de garder un nombre de modes constant assure la continuité des variables réduites (ξ_{vp}). Le travail effectué précédemment sur la manière de construire les modes permet d'obtenir un nombre quasiment constant de modes en fonction de la température tout en gardant un critère de sélection proche de $\alpha = 10^{-4}$.

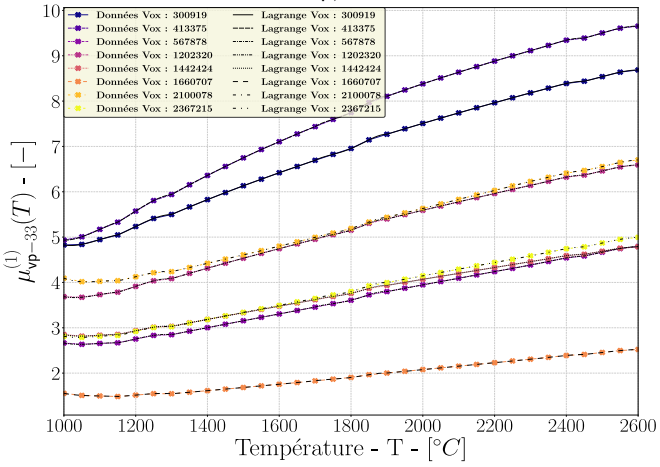
L'approche retenue est d'utiliser la méthode d'interpolation de Lagrange en une dimension pour faire dépendre les modes $(\boldsymbol{\mu}_{\mathsf{vp}}(T_0)$ et $\mu_{\mathsf{p}}(T_0))$ de la température. Il est à noter que les modes viscoplastiques $\boldsymbol{\mu}_{\mathsf{vp}}$, contrairement aux modes associés à l'écrouissage μ_{p}, sont des tenseurs d'ordre deux. Il faut donc faire une interpolation sur chacune des composantes de ces tenseurs.

L'intervalle de température utilisé pour l'interpolation est le suivant $T_0 \in [1000,\ 2600]\ [°C]$ avec un pas de température ΔT de $\Delta T = 50\ [°C]$. Cette intervalle est subdivisé en plusieurs intervalles afin de limiter le degré du polynôme d'interpolation : $I_0 \in [1000,\ 1150]\ [°C]$, $I_1 \in [1150,\ 1300]\ [°C]$,

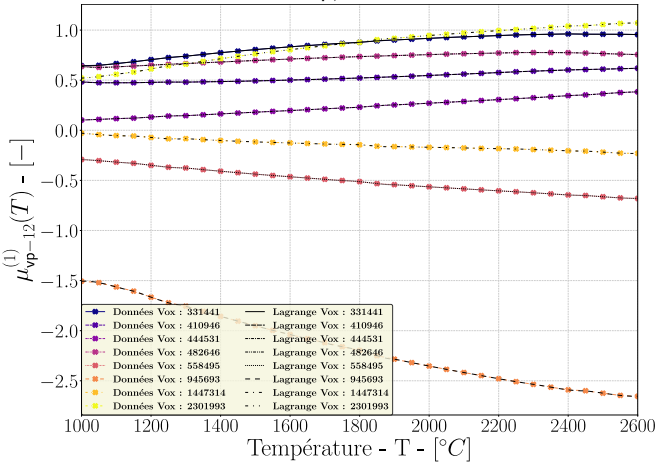
$I_2 \in [1300,\ 1500]$ [°C], $I_3 \in [1500,\ 1700]$ [°C], $I_4 \in [1700,\ 1900]$ [°C], $I_5 \in [1900,\ 2100]$ [°C], $I_6 \in [2100,\ 2300]$ [°C], $I_7 \in [2300,\ 2450]$ [°C], $I_8 \in [2450,\ 2600]$ [°C].



(a) $\mu^{(1)}_{\mathsf{vp},11}(T)$.



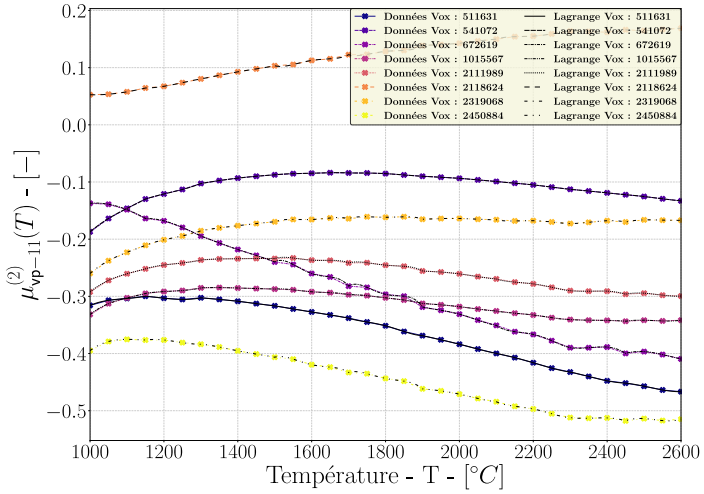
(b) $\mu^{(1)}_{\mathsf{vp},33}(T)$.



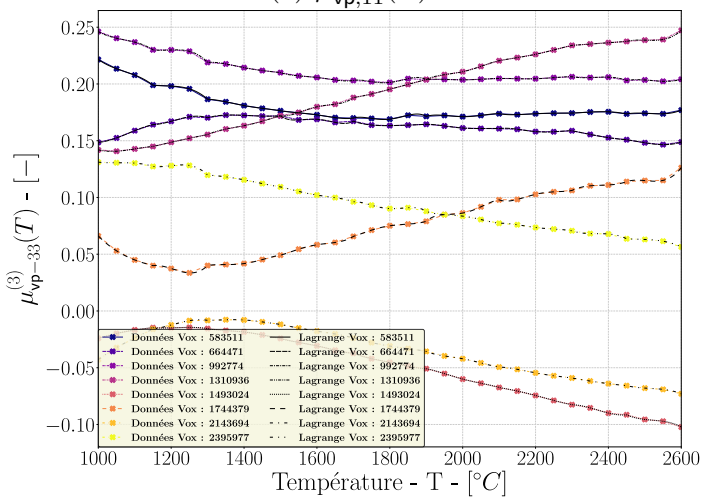
(c) $\mu^{(1)}_{\mathsf{vp},12}(T)$.

FIGURE VII.1 – Variations de quelques composantes du mode viscoplastique de plus grande valeur propre ($\mu^{(1)}_{\mathsf{vp}}$) en fonction de la température pour huit voxels tirés aléatoirement. En couleur les données numériques servant dans l'interpolation, en noir l'interpolation de Lagrange unidimensionnel.

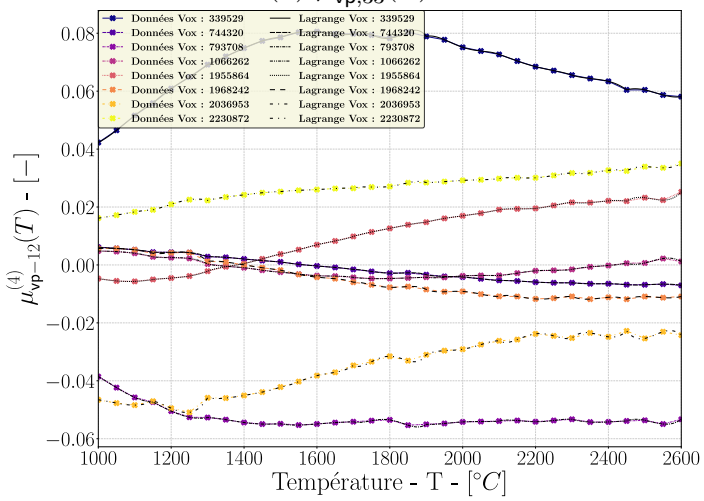
Les modes sont obtenus à chacune des températures intervenant dans l'interpolation via la méthode présentée précédemment. Les figures Fig. VII.1 et Fig. VII.2 illustrent la variation des quatre modes retenus et utilisés dans le modèle d'ordre réduit sur l'ensemble du domaine de température.



(a) $\mu^{(2)}_{\mathsf{vp},11}(T)$.



(b) $\mu^{(3)}_{\mathsf{vp},33}(T)$.



(c) $\mu^{(4)}_{\mathsf{vp},12}(T)$.

FIGURE VII.2 – Variations d'une composante des modes viscoplastiques $(\mu^{(2)}_{\mathsf{vp}}, \mu^{(3)}_{\mathsf{vp}}, \mu^{(4)}_{\mathsf{vp}})$ en fonction de la température pour huit voxels tirés aléatoirement. En couleur les données numériques servant dans l'interpolation, en noir l'interpolation de Lagrange unidimensionnel.

La première figure Fig. VII.1 illustre la variation du premier mode visco-plastique à la température pour trois composantes et huit voxels tirés aléatoirement dans le VER. La deuxième figure Fig. VII.2

illustre la variation des trois autres modes pour une composante et huit voxels tirés aléatoirement dans le VER.

À ce stade, les modes sont pris dépendant de la température avec $\boldsymbol{\mu}_{\mathsf{vp}}(T_0)$ et $\mu_{\mathsf{p}}(T_0)$. Il est à noter que la base modale pour une température quelconque T n'est plus orthogonale sauf aux températures alimentant l'interpolation. Comme vu précédemment dans la construction de la base modale pour un chargement triaxé, la propriété de l'orthogonalité de la base modale n'est pas nécessaire dans le modèle d'ordre réduit utilisé. Néanmoins, il est possible d'orthogonaliser la base modale en utilisant la POD sur les modes interpolés.

Le fait d'envisager une variation continue de température peut éventuellement ralentir le modèle d'ordre réduit dans le sens où il faut résoudre à chaque variation de température le problème élastique ou la moyenne du tenseur des déformations est pris nul et lorsqu'une pré-déformation visco-plastique est imposée Eq. V.10.

Afin de limiter ce problème la solution envisagée est d'interpoler également les tenseurs solutions des problèmes considérés à savoir ici, les tenseurs $\boldsymbol{\rho}_{\mathsf{vp}}(T_0)$ qui interviennent directement dans le modèle d'ordre réduit. Au même titre que l'interpolation sur les modes induit la perte de l'orthogonalité de la base modale, les tenseurs $\boldsymbol{\rho}_{\mathsf{vp}}(T_0)$ interpolés n'assurent plus la condition d'équilibre à savoir $div(\boldsymbol{\rho}_{\mathsf{vp}}(T_0)) \neq 0$ et par suite $div(\boldsymbol{\sigma}) \neq 0$. Une interpolation linéaire auraient permis de satisfaire l'équilibre.

VII.2 Prise en compte de la vitesse de déformation macroscopique

La température est prise en compte dans le modèle d'ordre réduit. Il reste à prendre en compte la vitesse de déformation macroscopique. Il existe plusieurs façons d'aborder le problème. La première idée venant à l'esprit serait de faire une interpolation à deux dimensions simultanément sur la température et la vitesse de déformation macroscopique. Deux problèmes se posent concernant l'interpolation en deux dimensions. Le premier concerne l'interpolation elle même. Il n'est pas sûr qu'une interpolation de Lagrange en deux dimensions soit efficace au cas considéré ici. Si une interpolation linéaire est privilégiée, il faudrait raffiner suffisamment le pas en température et le pas en vitesse de déformation pour couvrir l'ensemble du domaine. Ceci conduit au deuxième problème qui est celui du stockage. Une interpolation en deux dimensions nécessite un espace mémoire relativement important, ce qui peut être délétère à l'utilisation de la méthode.

Afin d'éviter une interpolation en deux dimensions et ainsi limiter les inconvénients qui vont avec, l'idée avancée est d'utiliser une base de modes déterminée à un certain couple de conditions de chargement de référence $(T_0, \dot{\bar{\varepsilon}}_0)$, à un certain couple de condition de chargement $(T, \dot{\bar{\varepsilon}})$. L'idée est donc d'utiliser une même base de modes pour plusieurs couples de conditions de chargement $(T, \dot{\bar{\varepsilon}})$. Il est fait l'hypothèse ici qu'il existe une fonction g pour laquelle il est possible de déduire $T = g_{|\dot{\bar{\varepsilon}}_0}(T_0, \dot{\bar{\varepsilon}})$. L'ensemble des températures T décrite par g lorsque la vitesse de déformation macroscopique varie $\dot{\bar{\varepsilon}}$, est appelé chemin. Sur ce chemin, les modes déterminés à $(T_0, \dot{\bar{\varepsilon}}_0)$ peuvent être réutilisés à $(T, \dot{\bar{\varepsilon}})$. Il reste alors à déduire la fonction f pour laquelle $T_0 = f_{|\dot{\bar{\varepsilon}}_0}(T, \dot{\bar{\varepsilon}})$. Ce faisant, les modes déterminés à $(T_0, \dot{\bar{\varepsilon}}_0)$ couvre l'ensemble des chargements $(T, \dot{\bar{\varepsilon}})$ pour lesquels le chemin est valide.

Si les tenseurs d'influence sont calculés à la « volée », alors il n'y a pas de problèmes. Pour le dire plus clairement, si à chaque variation du couple de sollicitations, le problème élastique à pré-déformation imposée et moyenne nulle est résolue (cf. Eq. V.10), le problème sur la dépendance à la température du tenseur d'élasticité, problème mentionné ci-dessous, ne se pose pas. La contrainte donnée ici est de s'affranchir de ce calcul à la « volée » des tenseurs d'influence. Il faut alors prendre quelques précautions en introduisant ce concept de chemin. En effet, cette contrainte a des conséquences sur l'élasticité à considérer dans le modèle. Jusqu'à présent l'élasticité, ou plus précisément le tenseur d'élasticité $\boldsymbol{L}$ est pris fonction de la température comme cela est observé expérimentalement.

Le fait de vouloir s'affranchir des calculs à la « volée » des tenseurs d'influence induit un mélange de deux élasticités. La première élasticité provient de la résolution du problème élastique où la moyenne du tenseur des déformations est pris nul et lorsqu'une pré-déformation visco-plastique est imposée (cf. Eq. V.10). Cette élasticité $\boldsymbol{L}(T_0)$ correspond à la température de référence T_0, température à laquelle les modes sont calculés $\boldsymbol{\mu}_{\mathsf{vp}}(T_0)$ ainsi que les tenseurs d'influences ($\boldsymbol{D} * \boldsymbol{\mu}_{\mathsf{vp}}$ et $\boldsymbol{\rho}_{\mathsf{vp}}$) provenant de la résolution du problème élastique à pré-déformation. La deuxième élasticité $\boldsymbol{L}(T)$ provient tout simplement de la résolution du problème d'ordre réduit qui a lieu à la température T. Il est donc nécessaire, dans l'optique de travailler sous la contrainte de ne pas calculer les tenseurs d'influence à la « volée », de prendre l'élasticité constante vis à vis de la température.

Dans la suite l'élasticité est supposée constante vis-à-vis de la température. La construction du chemin est explicité ci-dessous dans un cas de compression uniaxée à vitesse de déformation imposée. L'idée est d'utiliser la même base de modes aux couples $(T_0, \dot{\bar{\varepsilon}}_0)$ et $(T, \dot{\bar{\varepsilon}})$.

Afin de déterminer le bon couple $(T, \dot{\bar{\varepsilon}})$, une température de référence $T_0 \in [1000,\ 2600]$ $[°C]$ est posée à la vitesse de déformation macroscopique de référence $\dot{\bar{\varepsilon}}_0 = 10^{-1}$ $[s]^{-1}$. À ce couple de référence est effectué une simulation numérique en champ complet. Au temps final de la simulation numérique l'instantané viscoplastique est calculé. Cet instantané est appelé instantané de référence $\boldsymbol{\theta}^{\mathsf{f}}_{\mathsf{vp}}(T_0)$.

L'objectif est de chercher la température T à la vitesse de déformation macroscopique considérée $\dot{\bar{\varepsilon}}$ qui maximise la première valeur propre du POD trouvée entre l'instantané de référence $\boldsymbol{\theta}^{\mathsf{f}}_{\mathsf{vp}}(T_0)$ et l'instantané pris au temps final de la simulation effectuée au couple de sollicitations $(T, \dot{\bar{\varepsilon}})$. Ce maximum est déterminé de manière itérative.

Dans un premier temps, une dizaine de simulations numériques FFT en champ complet sont effectuées en faisant varier la température de manière grossière et ce pour avoir une idée approximative de la température T. Dans un deuxième temps, un polynôme d'interpolation d'ordre 2 est utilisé sur trois températures : la température pour laquelle la valeur propre est maximale (T_{max}), puis les deux températures encadrant cette première température($T_{\mathsf{max}-1}$ et $T_{\mathsf{max}+1}$). La fonction polynomiale d'ordre 2 est étudiée. Elle permet de déterminer approximativement la température pour laquelle la valeur propre est maximale. Dans un dernier temps, un processus itératif est utilisé. Trois simulations numériques FFT sont conduites à chaque itération. Les températures de l'itération n sont $T^n_{i-1}, T^n_i, T^n_{i+1}$ avec T^n_i la température pour laquelle la fonction polynomiale à l'itération précédente est maximale et : $T^n_{i+1} = T^n_i + 20,\ T^n_{i-1} = T^n_i - 20$. Le processus s'arrête lorsque $|T^n_i - T^{n-1}_i| < 1$. Il est à noter que le chemin est considéré bon si la valeur de la deuxième valeur propre normalisée issue du POD entre les deux derniers instantanés considérés est inférieure à $\alpha = 10^{-4}$, α critère utilisé dans la construction des modes.

En suivant cette procédure et pour quelques vitesses de déformation $\dot{\bar{\varepsilon}} \in [10^{-1},\ 10^{-4}]$ $[s]^{-1}$, la carte du chemin est explicitée Fig. VII.3. En pratique, dans la simulation numérique, c'est le couple $(T, \dot{\bar{\varepsilon}})$ qui est connu et non le couple de référence $(T_0, \dot{\bar{\varepsilon}}_0)$. Il reste donc à préciser comment remonter au couple de référence $(T_0, \dot{\bar{\varepsilon}}_0)$, afin d'appeler les modes correspondants, aux conditions de sollicitation données $(T, \dot{\bar{\varepsilon}})$.

La carte des chemins Fig. VII.3 est déterminée exactement pour quelques sollicitations. Enfin pour couvrir l'ensemble du domaine, il est utilisé une interpolation linéaire pour relier les données déterminées exactement. Le couple de référence est déterminé en utilisant les barycentres : si la température T est le barycentre de (T^{-1}, T^{+1}), alors T_0 est le barycentre de (T_0^{-1}, T_0^{+1}) et ce en utilisant la même pondération que pour la température T. Plus concrètement, en se donnant une certaine condition de chargement $(T, \dot{\bar{\varepsilon}})$, il est possible de déterminer les deux températures (T^{-1}, T^{+1}) tel que $T^{-1} < T$, $T^{+1} > T$, avec (T^{-1}, T^{+1}) appartenant aux chemins les plus proches de la température T à la vitesse de déformation macroscopique $\dot{\bar{\varepsilon}}$ donnée. En suivant le chemin, (T_0^{-1}, T_0^{+1}) sont connues. Il est possible de poser $a = \frac{T - T^{-1}}{T^{+1} - T^{-1}}$. En s'appuyant sur l'hypothèse de travail, $a = \frac{T_0 - T_0^{-1}}{T_0^{+1} - T_0^{-1}}$. En combinant les différentes relations, la température T_0 est entièrement déterminée.

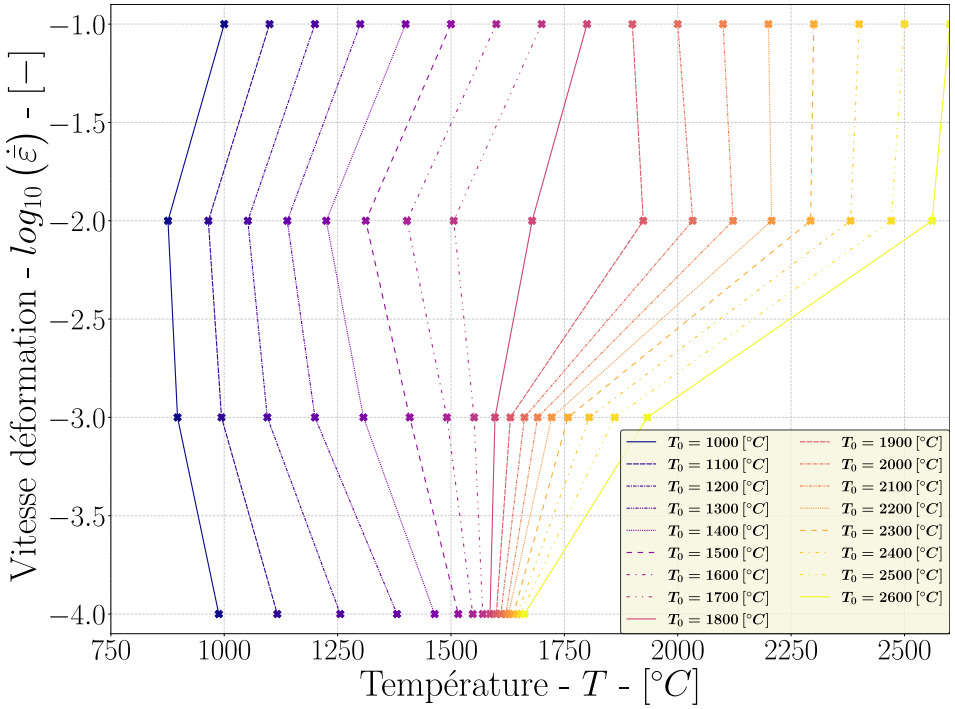


FIGURE VII.3 – Détermination du chemin pour $\dot{\bar{\varepsilon}}_0 = 10^{-1}\ [s]^{-1}$ et $T_0 \in [1000, 2600]\ [°C]$ avec $\Delta T = 100\ [°C]$. Le chemin est exact pour les vitesses $\dot{\bar{\varepsilon}} \in [|10^{-2}, 10^{-3}, 10^{-4}|]\ [s]^{-1}$ et l'ensemble des températures T_0 ainsi posées. Utilisation d'une interpolation linéaire entre les données exact d'un même chemin.

VII.3 Comparaison entre le modèle en champ complet et le modèle d'ordre réduit avec prise en compte des conditions de sollicitation que sont la température et la vitesse de déformation macroscopique

VII.3.1 Comparaison sur quelques essais de compressions uniaxés du modèle en champ complet FFT et du modèle d'ordre réduit NTFA TSO

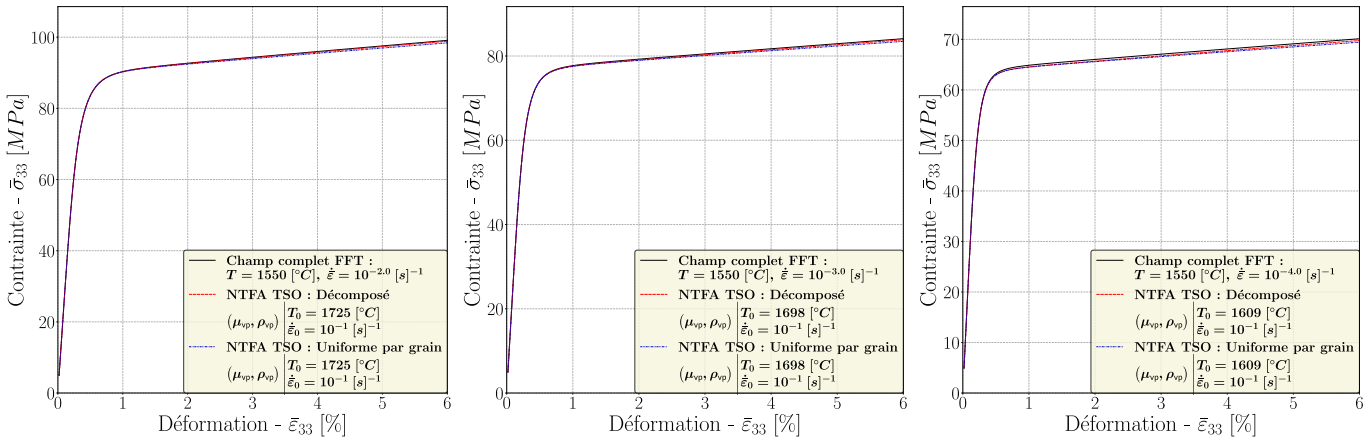
Cette section s'attache à étudier la bonne tenue et la précision du modèle d'ordre réduit NTFA TSO vis-à-vis de simulations numériques en champ complet lorsque le chemin et l'interpolation en température des modes sont utilisés, c'est-à-dire lorsqu'une base de modes déterminée à $(T_0, \dot{\bar{\varepsilon}}_0)$ est utilisée à un certain couple $(T, \dot{\bar{\varepsilon}})$. Pour ce faire cinq cas de chargement sont retenus, chargements correspondants à des essais de compression uniaxés à vitesse de déformation imposée et pour différentes températures. La comparaison se fait à deux échelles, d'une part à l'échelle macroscopique et d'autre part à l'échelle locale où la distribution de la norme des contraintes est utilisée.

Les réponses numériques issues d'une part d'une simulation en champ complet FFT et d'autre part du modèle d'ordre réduit NTFA TSO sont comparées pour les mêmes conditions de chargement.

VII.3.1.1 Réponses effectives

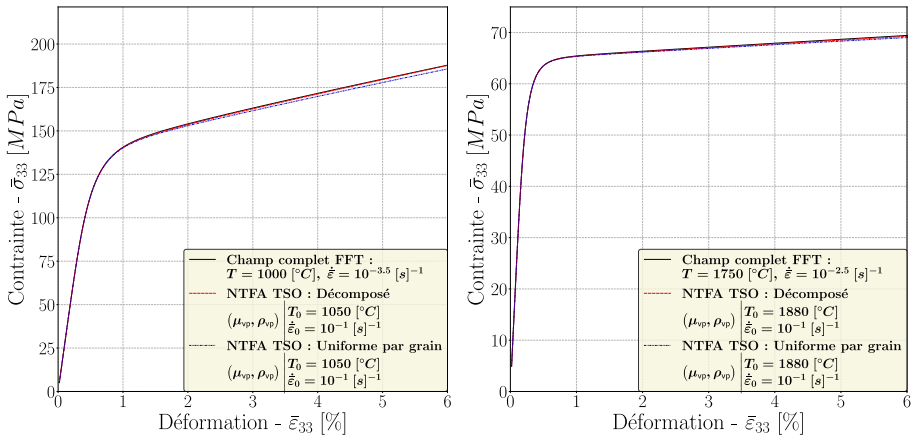
Pour les cinq cas de chargement, la contrainte macroscopique dans la direction de charge est montrée en fonction de la déformation macroscopique dans la même direction.

Les trois cas de chargement permettent de tester la bonne tenue du modèle d'ordre réduit lorsque



(a) $T = 1550$ [°C], $\dot{\bar{\varepsilon}} = 10^{-2}$ $[s]^{-1}$ $T_0 = 1725$ [°C], $\dot{\bar{\varepsilon}}_0 = 10^{-1}$ $[s]^{-1}$. (b) $T = 1550$ [°C], $\dot{\bar{\varepsilon}} = 10^{-3}$ $[s]^{-1}$ $T_0 = 1698$ [°C], $\dot{\bar{\varepsilon}}_0 = 10^{-1}$ $[s]^{-1}$. (c) $T = 1550$ [°C], $\dot{\bar{\varepsilon}} = 10^{-4}$ $[s]^{-1}$ $T_0 = 1609$ [°C], $\dot{\bar{\varepsilon}}_0 = 10^{-1}$ $[s]^{-1}$.

FIGURE VII.4 – Contrainte $\bar{\sigma}_{33}$ en fonction de la déformation $\bar{\varepsilon}_{33}$. Comparaison entre le modèle en champ complet FFT (noir), et le modèle d'ordre réduit NTFA TSO pour le cas décomposé (rouge) et uniforme par grain (bleu).



(a) $T = 1000$ [°C], $\dot{\bar{\varepsilon}} = 10^{-3.5}$ $[s]^{-1}$ $T_0 = 1050$ [°C], $\dot{\bar{\varepsilon}}_0 = 10^{-1}$ $[s]^{-1}$. (b) $T = 1750$ [°C], $\dot{\bar{\varepsilon}} = 10^{-2.5}$ $[s]^{-1}$ $T_0 = 1880$ [°C], $\dot{\bar{\varepsilon}}_0 = 10^{-1}$ $[s]^{-1}$.

FIGURE VII.5 – Contrainte $\bar{\sigma}_{33}$ en fonction de la déformation $\bar{\varepsilon}_{33}$. Comparaison entre le modèle en champ complet FFT (noir), et le modèle d'ordre réduit NTFA TSO pour le cas décomposé (rouge) et uniforme par grain (bleu).

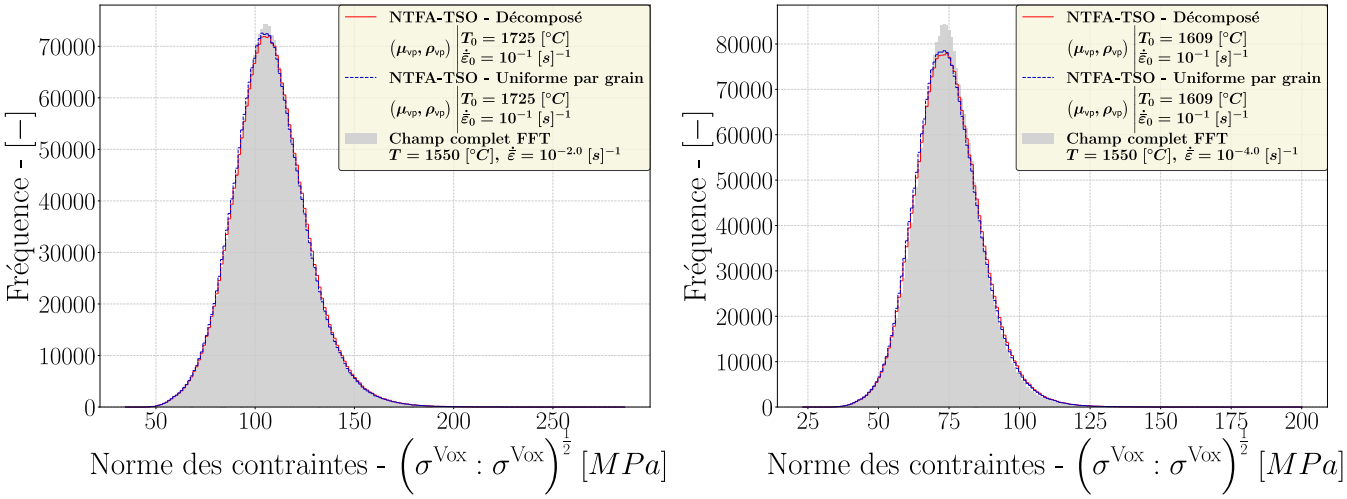
la vitesse de déformation macroscopique s'éloigne de la vitesse de déformation de référence. Les vitesses étudiées ici sont les vitesses retenues pour un calcul explicite du chemin. Les deux derniers cas étudiés (Fig. VII.5) permettent de tester complètement le chemin ainsi que la méthode proposée, méthode basée sur les barycentres, pour remonter au couple de sollicitation de référence $(T_0, \dot{\bar{\varepsilon}}_0)$, couple où sont déterminés les modes. Dans les cinq cas, l'interpolation en température des modes est testée.

À l'échelle macroscopique, comme illustré Fig. VII.4 et Fig. VII.5, il y a un très bon accord entre les résultats numériques issus des simulations en champ complet FFT et des simulations du modèle d'ordre réduit NTFA TSO et ce pour les cinq cas de chargements étudiés.

Lorsque la variable d'écrouissage est prise décomposée, les résultats sont meilleurs que lorsque cette variable est prise uniforme par grain, en particulier lorsque l'écrouissage est important (faible température). La différence entre les deux décompositions reste malgré tout faible. Les deux cas donnent de très bon résultats.

VII.3.1.2 Réponses locales

Pour ce qui est de la réponse locale quatre conditions de chargement sont étudiées. En notant que l'écart entre le modèle d'ordre réduit NTFA TSO et le modèle en champ complet FFT est croissant lorsque la déformation macroscopique ($\bar{\varepsilon}_{33}$) augmente, seul l'instant final (qui est alors le pire des cas) de la simulation est étudié. La comparaison est faite entre le modèle en champ complet FFT et le modèle d'ordre réduit NTFA TSO et ce avec les différents cas étudiés (décomposé ou uniforme par grain).



(a) $T = 1550$ [°C], $\dot{\bar{\varepsilon}} = 10^{-2}$ [s]$^{-1}$
$T_0 = 1725$ [°C], $\dot{\bar{\varepsilon}}_0 = 10^{-1}$ [s]$^{-1}$.

(b) $T = 1550$ [°C], $\dot{\bar{\varepsilon}} = 10^{-4}$ [s]$^{-1}$
$T_0 = 1609$ [°C], $\dot{\bar{\varepsilon}}_0 = 10^{-1}$ [s]$^{-1}$.

FIGURE VII.6 – Conditions de chargement définies par $\bar{\varepsilon}_{33} = 6$ [%]. Comparaison pour un essai d'écrouissage triaxé des simulations issues du modèle en champ complet FFT (gris) et du modèle d'ordre réduit NTFA TSO pour le cas décomposé (rouge) et uniforme par grain (bleu). La distribution de la norme euclidienne des contraintes est comparée.

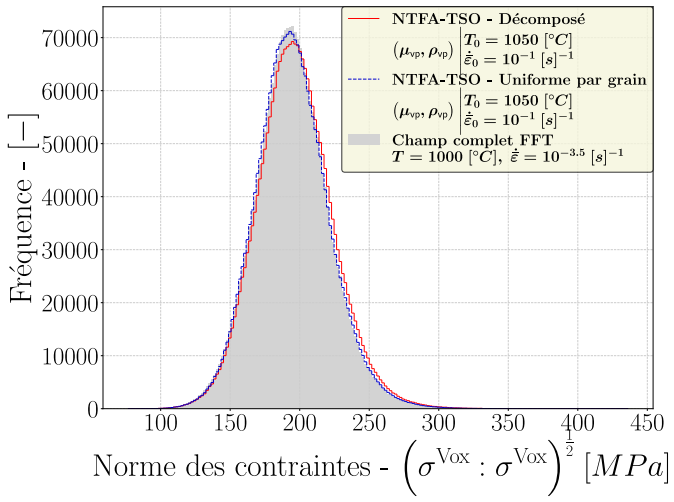
Toujours en s'appuyant sur Eq. V.17, le tenseur des contraintes ou des déformations ne sont que de simples combinaisons linéaires de champs préalablement calculés, champs qui sont pondérés par les variables internes réduites (ξ_{vp}, $\bar{\varepsilon}$). En particulier, le tenseur des contraintes est reconstruit et l'histogramme de répartition de la norme quadratique de ce tenseur défini aux voxels est comparé entre les deux approches.

Pour l'ensemble des conditions de chargement, la distribution obtenue par le modèle d'ordre réduit NTFA, est en bon accord avec celui obtenu par le modèle en champ complet FFT (voir Fig. VII.6 et Fig. VII.7). L'écart entre les deux décompositions est, de nouveau, peu perceptible à cette échelle.

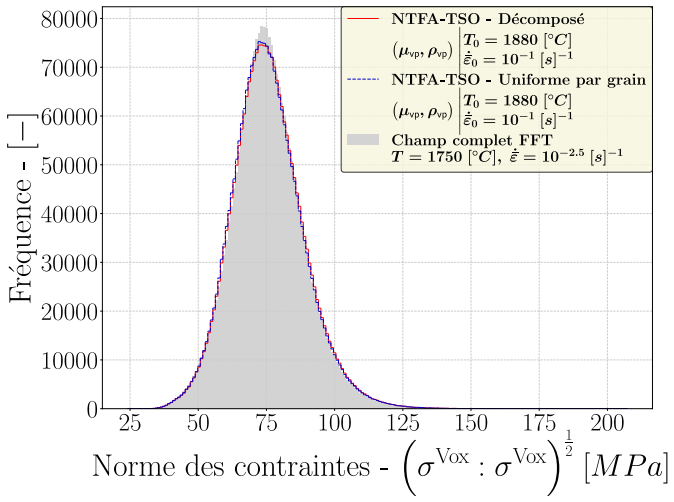
En conclusion le modèle d'ordre réduit est tout aussi efficace et précis à l'échelle locale qu'à l'échelle macroscopique lorsque le chemin et l'interpolation des modes sont faits pour un cas de chargement uniaxé.

VII.3.2 Comparaison sur quelques essais de compression triaxés du modèle en champ complet FFT et du modèle d'ordre réduit NTFA TSO

La section suivante s'attache à étudier la bonne tenue et la précision du modèle d'ordre réduit NTFA TSO vis-à-vis de simulations numériques en champ complet lorsque le chemin et l'interpolation en température des modes sont utilisés. L'axe de chargement n'est plus uniaxé mais triaxé quelconque. Les cas de chargement correspondent à des essais triaxés à vitesse de déformation imposée et pour différentes températures. La comparaison se fait aux deux échelles.



(a) $T = 1000$ [°C], $\dot{\bar{\varepsilon}} = 10^{-3.5}$ $[s]^{-1}$
$T_0 = 1050$ [°C], $\dot{\bar{\varepsilon}}_0 = 10^{-1}$ $[s]^{-1}$.



(b) $T = 1750$ [°C], $\dot{\bar{\varepsilon}} = 10^{-2.5}$ $[s]^{-1}$
$T_0 = 1880$ [°C], $\dot{\bar{\varepsilon}}_0 = 10^{-1}$ $[s]^{-1}$.

FIGURE VII.7 – Conditions de chargement définies par $\bar{\varepsilon}_{33} = 6$ [%]. Comparaison pour un essai d'écrouissage triaxé des simulations issues du modèle en champ complet FFT (gris) et du modèle d'ordre réduit NTFA TSO pour le cas décomposé (rouge) et uniforme par grain (bleu). La distribution de la norme euclidienne des contraintes est comparée.

Comme précédemment un algorithme piloté en déformation et à direction de contrainte imposée est utilisée. On considère un chargement triaxé quelconque de la forme $\Sigma_0 = [a\ b\ c\ 0\ 0\ 0]$ où Σ_0 est la direction de contrainte imposée (direction de chargement) notée avec la convention de Kelvin et (a, b, c) des coefficients quelconques.

Trois chargements élémentaires sont considérés, à savoir $\Sigma_0^{11} = [1\ 0\ 0\ 0\ 0\ 0]$, $\Sigma_0^{22} = [0\ 1\ 0\ 0\ 0\ 0]$ et $\Sigma_0^{33} = [0\ 0\ 1\ 0\ 0\ 0]$ desquels sont déduites les familles de modes dites élémentaires $\{\boldsymbol{\mu}_{\text{vp}}^{\mathbf{11}}\}$, $\{\boldsymbol{\mu}_{\text{vp}}^{\mathbf{22}}\}$ et $\{\boldsymbol{\mu}_{\text{vp}}^{\mathbf{33}}\}$.

De ces familles élémentaires, la base de modes considérés pour le chargement triaxé est une concaténation des familles élémentaires à savoir $\{\boldsymbol{\mu}_{\text{vp}}\} = \{\{\boldsymbol{\mu}_{\text{vp}}^{\mathbf{11}}\}, \{\boldsymbol{\mu}_{\text{vp}}^{\mathbf{22}}\}, \{\boldsymbol{\mu}_{\text{vp}}^{\mathbf{33}}\}\}$. Un travail similaire est effectué sur les modes qui concernent les variables d'écrouissage (p_{i}).

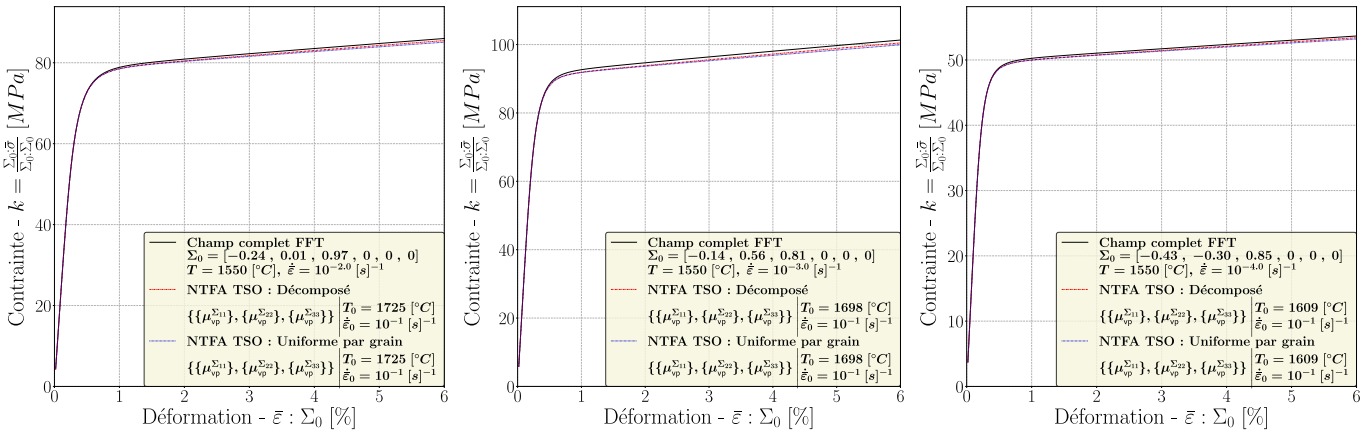
Ce même travail est à faire sur les cinq cas de sollicitations retenus dans l'étude du chargement uniaxé faite précédemment, étude qui fait intervenir l'interpolation des modes et l'utilisation du chemin.

VII.3.2.1 Réponses effectives

Pour ces cinq cas de chargement, le niveau de contrainte $k = \frac{\Sigma_0 : \bar{\sigma}}{\Sigma_0 : \Sigma_0}$ est tracé en fonction de la déformation projetée $\bar{\varepsilon} : \Sigma_0$, où Σ_0 est la direction de contrainte, $\bar{\sigma}$ est la contrainte moyenne, $\bar{\varepsilon}$ est la déformation moyenne. Cinq directions déterminées aléatoirement sont testées.

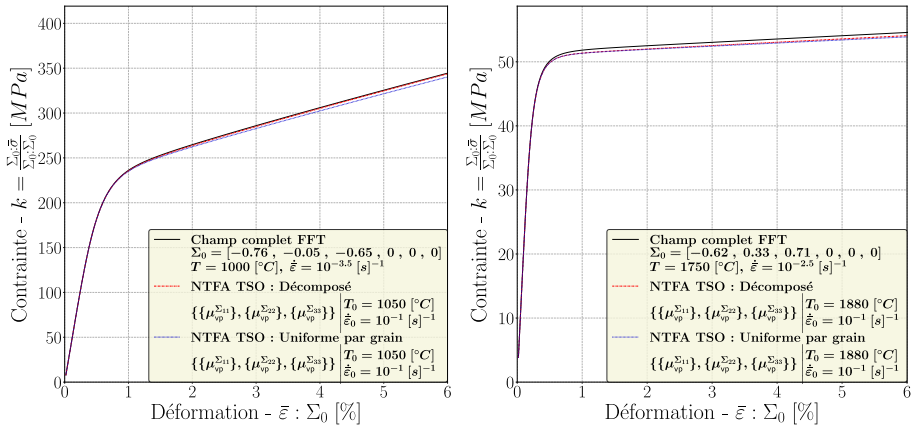
À l'échelle macroscopique, comme illustré Fig. VII.8 et Fig. VII.9, il y a un très bon accord entre les résultats numériques issus des simulations en champ complet FFT et ceux issus des simulations du modèle d'ordre réduit NTFA TSO et ce pour les cinq cas de chargements ainsi que l'ensemble des directions étudiées. Il est rappelé ici que le chemin ainsi que l'interpolation en température des modes sont testés pour les cinq exemples étudiés.

Lorsque la variable d'écrouissage est prise décomposée, les résultats sont meilleurs que lorsque cette variable est prise uniforme par grain, en particulier lorsque l'écrouissage est important (faible température). La différence entre les deux décompositions reste malgré tout faible. Les deux cas donnent de très bon résultats.



(a) $\Sigma_0 = [-.24, .01, .97]$, $X = 0.22$. (b) $\Sigma_0 = [-.14, .56, .81]$, $X = 0.48$. (c) $\Sigma_0 = [-.43, -.3, .85]$, $X = 0.03$.

FIGURE VII.8 – Une mesure du niveau de contrainte $k = \frac{\Sigma_0:\bar{\sigma}}{\Sigma_0:\Sigma_0}$ en fonction de la déformation $\bar{\varepsilon} : \Sigma_0$.



(a) $\Sigma_0 = -[.85, .05, .65]$, $X = -0.06$. (b) $\Sigma_0 = [-.62, .33, .71]$, $X = 0.11$.

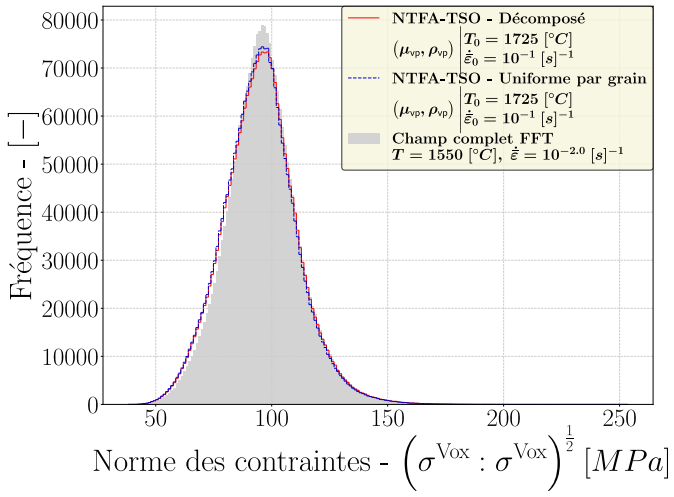
FIGURE VII.9 – Une mesure du niveau de contrainte $k = \frac{\Sigma_0:\bar{\sigma}}{\Sigma_0:\Sigma_0}$ en fonction de la déformation $\bar{\varepsilon} : \Sigma_0$.

VII.3.2.2 Réponses locales

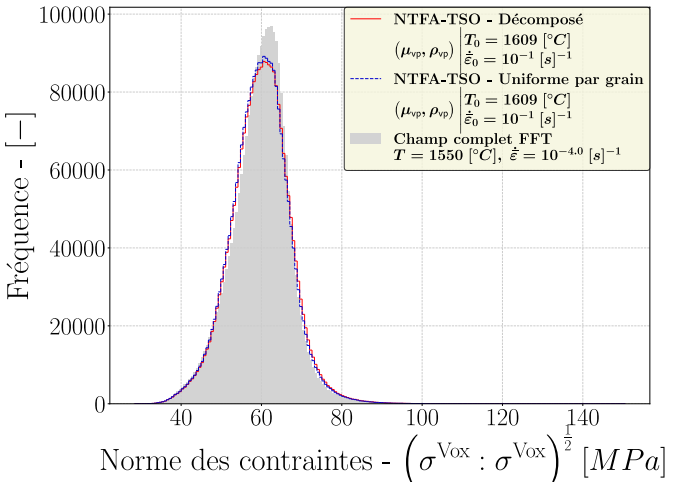
Pour ce qui est de la réponse locale quatre directions de chargement sont étudiées. En notant que l'écart entre le modèle d'ordre réduit NTFA TSO et le modèle à champ complet FFT est croissant lorsque la déformation macroscopique augmente, seul le temps final (qui est alors le pire des cas) de la simulation est étudié. La comparaison est faite entre le modèle en champ complet et le modèle d'ordre réduit NTFA TSO et ce avec les différents cas étudiés (décomposé ou uniforme par grain).

Pour l'ensemble des conditions de chargement, la distribution obtenue par le modèle d'ordre réduit NTFA, est en bon accord avec celle obtenue par le modèle en champ complet FFT (voir Fig. VII.10 et Fig. VII.11). L'écart entre les deux décompositions est de nouveau peu perceptible à cette échelle.

En conclusion le modèle d'ordre réduit est tout aussi efficace et précis à l'échelle locale qu'à l'échelle macroscopique pour un cas de chargement triaxé et ce en utilisant les deux approximations permettant de couvrir l'ensemble des conditions de sollicitation $(T, \dot{\bar{\varepsilon}})$ considérées. Les deux approximations sont l'interpolation en température des modes et l'utilisation d'un chemin pour intégrer la dépendance à la vitesse de déformation macroscopique.

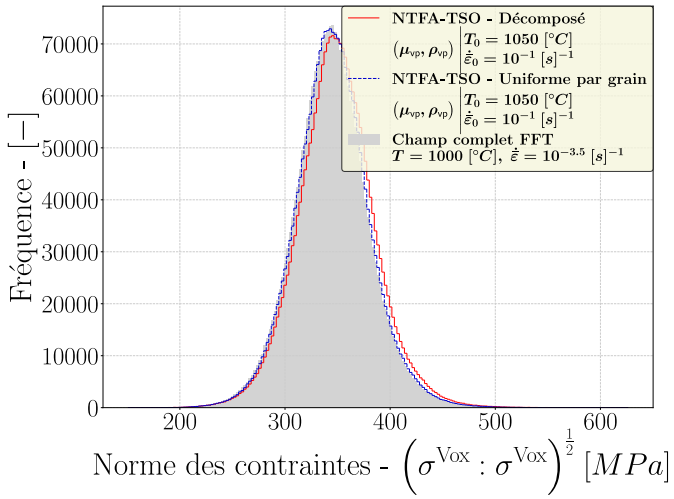


(a) $\Sigma_0 = [-.24, .01, .97]$, $X = 0.22$.

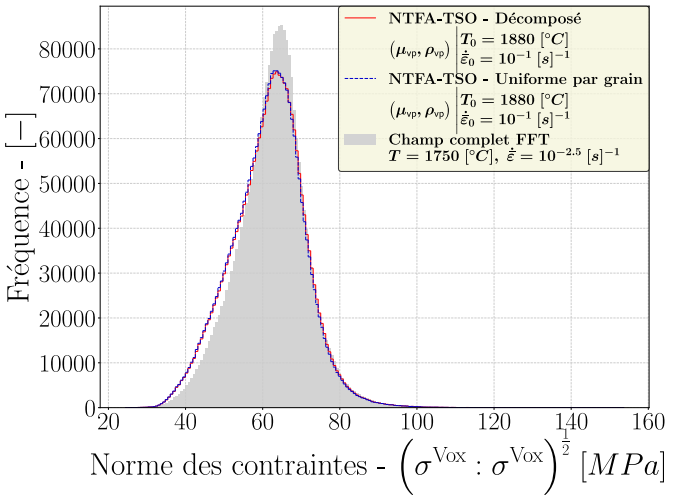


(b) $\Sigma_0 = [-.43, -.3, .85]$, $X = 0.03$.

FIGURE VII.10 – Conditions de chargement définies par $\bar{\varepsilon}$: $\Sigma_0 = 6$ [%]. Comparaison pour un essai d'écrouissage triaxé des simulations issues du modèle en champ complet FFT (gris) et du modèle d'ordre réduit NTFA TSO pour le cas décomposé (rouge) et uniforme par grain (bleu). La distribution de la norme quadratique des contraintes locales est utilisée.



(a) $\Sigma_0 = [-.85, -.05, -.65]$, $X = -0.06$.



(b) $\Sigma_0 = [-.62, .33, .71]$, $X = 0.11$.

FIGURE VII.11 – Conditions de chargement définies par $\bar{\varepsilon}$: $\Sigma_0 = 6$ [%]. Comparaison pour un essai d'écrouissage triaxé des simulations issues du modèle en champ complet FFT (gris) et du modèle d'ordre réduit NTFA TSO pour le cas décomposé (rouge) et uniforme par grain (bleu). La distribution de la norme quadratique des contraintes locales est utilisée.

Conclusion

Dans ces travaux de thèse, un formalisme de loi locale monocristaline a été reprise des travaux de [**Portelette 2018**] s'inscrivant dans la continuité de ceux de [**Pacull 2011 ; Soulacroix 2014**]. Cette loi rend compte de manière empirique du franchissement de la barrière de Peierls [**Peierls 1940**] des lignes de dislocations mobiles par double décrochement. Suite à la bibliographie effectuée sur le comportement des monocristaux, il n'apparait pas clairement que la déformation viscoplastique soit induite uniquement, voire majoritairement, par ce mécanisme. Cette loi hyperbolique est calibrée via des essais expérimentaux d'écrouissage menés sur monocristaux [**Byron 1968a ; Mordike 1976 ; Sawbridge et Sykes 1971**]. Il est à préciser qu'à cette échelle les résultats sont relativement anciens, qu'ils présentent une certaine disparité et qu'ils sont parfois en désaccord pour des conditions qui paraissent semblables.

Une fois la loi monocristalline calibrée, celle-ci est utilisée dans un VER polycrisallin avec l'orientation locale spécifique à chaque grain. L'hypothèse faite est qu'il n'y a pas de modification de comportement aux bords des grains autre que l'incompatibilité de déformation due à la différence d'orientation avec le grain voisin. Cette hypothèse est discutable notamment si le joint de grain ou les grains voisins interagissent sur le mouvement des dislocations. Les résultats numériques obtenus via des simulations en champ complet se révèlent éloignés des résultats expérimentaux, résultats qui dépendent fortement des conditions de sollicitation que sont la température et la vitesse de déformation macroscopique, issus d'essais d'écrouissage menés sur polycristaux [**Salvo 2014**]. Le remontage d'échelle n'est pas efficient.

Pour pallier cet écart et espérer retrouver les résultats expérimentaux de [**Salvo 2014 ; Ben Saada 2017**] obtenus à l'échelle polycristalline, un second formalisme de loi locale monocristalline est postulé. Ce formalisme se base sur les travaux de [**Knezevic et al. 2013**]. Il se veut certes plus empirique, mais il est aussi plus simple et permet plus de liberté dans le choix des coefficients et notamment leurs dépendances vis-à-vis des paramètres de sollicitation. Une procédure d'identification inverse de cette loi monocristalline est proposée. Cette méthode s'appuie uniquement sur les résultats expérimentaux de [**Salvo 2014 ; Ben Saada 2017**] obtenus à l'échelle polycristalline ainsi que de quelques observations, particulièrement dans le choix des familles à considérer, faites à l'étape précédente. Le but visé est de retrouver le comportement asymptotique des résultats obtenus expérimentalement. Après analyse, la loi locale est prise élasto viscoplastique avec écrouissage isotrope linéaire.

Les résultats numériques issus de simulations en champ complet, faisant suite au processus d'identification inverse, sont en bon accord avec les résultats expérimentaux de [**Salvo 2014 ; Ben Saada 2017**], et ce, pour une large gamme de températures et de vitesses de déformation macroscopique. Le formalisme est jugé satisfaisant pour développer la méthode de réduction de modèle NTFA.

Pour ce qui est de la méthode NTFA, les travaux se basent principalement sur [**Michel et Suquet 2016b**]. Deux décompositions sont étudiées. En particulier, la variable d'écrouissage est prise uniforme par grain [**Michel et Suquet 2016b**] ou décomposée, à l'image du tenseur des déformations viscoplastiques, sur des modes. Le cas décomposé présente de meilleurs résultats, vis-à-vis des simulations menées en champ complet, simulations en champ complet qui sont prises comme références, que le cas uniforme par grain pour des chargements uniaxés et triaxés. En particulier, la pente d'écrouissage est mieux prise en compte. Pour le cas d'un chargement quelconque, c'est le cas uniforme par grain qui se trouve être plus pertinent et robuste par rapport au cas décomposé.

Néanmoins, sur le chargement quelconque, il semble que la manière de construire la base modale n'est pas pertinente. Plus précisément, concaténer les bases modales issues des chargements élémentaires ne suffit par pour ce cas de chargement. Un travail doit être envisagé pour proposer une méthode systématique de construction des modes et éventuellement intégrer des chargements quelconques.

Pour ce qui est des temps de simulation, la NTFA avec le cas uniforme par grain est environ 750 fois plus rapide que la méthode en champ complet FFT et 1.8 fois plus rapide que la NTFA avec le cas décomposé.

Avant de trancher pour l'un des deux cas, décomposé ou uniforme, il est à mentionner qu'il y ait de fortes chances que les écarts entre les deux décompositions se creusent si l'exposant n est pris plus élevé, autrement dit si la non-linéarité considérée est plus importante. Également, d'un point de vue analytique et au niveau de l'implémentation, le cas décomposé est plus lourd à mettre en oeuvre que le cas uniforme. Ce sera à l'utilisateur d'arbitrer entre la précision souhaitée et le temps de simulation pour faire un choix entre le cas décomposé et uniforme.

Pour finir, les conditions de sollicitations (température et vitesse de déformation macroscopique), qui peuvent être variables, ont été prises en compte dans le modèle NTFA. Cela s'est fait par la définition de conditions de sollicitation de référence, puis l'interpolation des modes en température pour ces conditions. Une contrainte a été posée, contrainte qui consiste à ne pas résoudre les problèmes thermoélastiques à pré-déformation imposée (avec le mode comme pré-déformation) et la moyenne des déformations est imposée nulle. Ceci conduit à considérer l'élasticité constante en température, et à ne plus assurer la condition d'équilibre $div(\boldsymbol{\sigma}) \neq 0$, dû à l'interpolation de Lagrange des tenseurs $\boldsymbol{\rho}$ intervenant dans les équations d'évolution des variables réduites. Une interpolation linéaire pourrait permettre de garantir la condition d'équilibre.

Enfin, une variation de vitesse de déformation macroscopique a été prise en compte par la définition d'un chemin sur lequel une même base modale est utilisée. Cette méthode a été préférée à une interpolation en deux dimensions, sur la température et sur la vitesse de déformation. L'interpolation en deux dimensions nécessite une quantité de ressource numérique importante.

Les résultats ne sont pas détériorés, pour des chargements uniaxés et triaxés aussi bien à l'échelle macroscopique que locale.

Quelques points restent à travailler, notamment expliciter une méthode de construction systématique des modes, envisager une manière différente de prendre en compte les conditions de sollicitation dans le modèle NTFA, étudier la construction de la base modale pour pouvoir rendre compte efficacement de chargements quelconques.

Perspectives

Plusieurs perspectives peuvent être envisagées.

La première concerne le comportement du dioxyde d'uranium. Il apparait nécessaire de conduire de nouvelles campagnes expérimentales tout aussi bien à l'échelle des monocristaux qu'à l'échelle des polycristaux. Dans un premier cas, les données expérimentales disponibles présentent des variations relativement importantes pour des caractéristiques similaires. Une nouvelle campagne d'essais à cette échelle permettrait de lever certaines indéterminations et d'asseoir certaines assertions concernant les mécanismes induisant la déformation viscoplastique. Il pourrait être intéressant d'effectuer des essais sur bicristaux afin de regarder l'impact des joints de grains sur la réponse mécanique. Enfin à l'échelle polycristalline une campagne d'essais permettrait de conforter les résultats existants, voire de tester des gammes de températures et de vitesses de déformation plus exigeantes pour positionner l'extrapolation des lois existantes.

En complément à cette première remarque, il apparait pertinent de retravailler la loi de comportement locale (monocristalline) proposée ici. En effet, la dépendance à la vitesse de déformation n'est pas bien prise en compte dans ce formalisme. Ce qui pose un problème, c'est la dépendance à ce paramètre de chargement, dépendance qui intervient explicitement alors que dans une loi puissance classique, c'est l'exposant n qui porte cette dépendance. Ici cette formulation, inspirée de travaux antérieurs, permet de capter la dépendance à la fois en température et en vitesse de déformation macroscopique. Dans ces travaux, les limites de la loi puissance ont été atteintes. Il n'a pas été possible d'identifier directement les paramètres pour que la loi rende compte des résultats expérimentaux obtenus à l'échelle polycristalline sur une large gamme de températures et de vitesses de déformation comme rencontré lors d'un RIA. Il faudrait éventuellement exhiber un nouveau formalisme de loi, formalisme qui permettrait de prendre en compte différemment la sensibilité à la vitesse de déformation. Il pourrait également être envisagé un travail directement sur la loi puissance.

Une chose qui ne parait pas complètement satisfaisante dans ces travaux, est la prise en compte des conditions de sollicitation dans le modèle d'ordre réduit. L'interpolation de Lagrange unidimensionnelle en température sur les modes et les tenseurs d'influence requiert une capacité de stockage relativement importante. Une idée pourrait être de se tourner vers l'IA et éventuellement du machine learning ou deep learning pour générer les modes et tenseurs d'influence. Ces derniers seraient fonctions des conditions de sollicitation. L'objectif est de minimiser la place nécessaire pour faire tourner le modèle sur de larges gammes de sollicitations.

En complément de cette remarque, il apparaît nécessaire d'effectuer un travail sur la construction des modes. Il faudrait développer une méthode plus robuste et générale, à l'image de la NTFA TSO, pouvant considérer différents problèmes. Pour ce faire, il paraîtrait intéressant de regarder plus en détail ce qu'il se fait dans le milieu de l'hyper réduction, par exemple avec des calculs d'instantanés et des calculs de modes à la volée.

Pour compléter sur les perspectives concernant l'approche NTFA, les travaux de [**Leturcq et al. 2022**] qui étudient le fluage d'assemblage combustible, peuvent être intéressant à regarder.

Enfin, la dernière perspective qui rejoint la problématique industrielle qui consiste à évaluer la fraction volumique de combustible potentiellement expulser du crayon combustible lors d'un accident et ce en cas de rupture de gaine, serait de développer un modèle élasto viscoplastique endommageable afin d'aborder les aspects de fissuration. Je n'ai pas étudié en profondeur la théorie derrière

les méthodes proposées dans la littérature, néanmoins je m'orienterai préférentiellement vers deux méthodes.

La première serait de prendre en compte l'endommagement par la méthode champ de phase avec une approche variationnelle intégrant l'élasto viscoplasticité, à l'image de [**Alessi et al. 2015**] en élastoplasticité. Le problème qui se pose est, qu'actuellement les matériaux sensible à la vitesse de déformation ne sont pas pris en compte dans les formulations variationnelles proposées. Cette piste pourrait éventuellement permettre, à long terme, de développer un modèle d'ordre réduit intégrant les aspects d'endommagement et de fissuration.

La deuxième méthode est inspirée d'une présentation de J.-J. Marigo lors de la conférence de ESMC 2022, à Galway en Irlande. Il présente le modèle de zone cohésive comme l'avenir pour traiter les aspects de fissuration.

VIII Bibliographie

[1] **Alamo A., Lefebvre J.M. et Soullard J.** « Deformation plastique du bioxyde d'uranium : Observation des sous-structures de dislocations ». In : *Journal of Nuclear Materials* 75.1 (1978), pages 145-153. ISSN : 0022-3115. DOI : 10.1016/0022-3115(78)90038-7.

[2] **Alessi R., Marigo J.-J. et Vidoli S.** « Gradient damage models coupled with plasticity : Variational formulation and main properties ». In : *Mechanics of Materials* 80 (2015). Materials and Interfaces, pages 351-367. ISSN : 0167-6636. DOI : 10.1016/j.mechmat.2013.12.005.

[3] **Armstrong W.M., Causey A.R. et Sturrock W.R.** « Creep of single-crystal UO_2 ». In : *Journal of Nuclear Materials* 19.1 (1966), pages 42-49. ISSN : 0022-3115. DOI : 10.1016/0022-3115(66)90127-9.

[4] **Armstrong W.M. et Irvine W.R.** « Creep deformation of non-stoichiometric uranium dioxide ». In : *Journal of Nuclear Materials* 9.2 (1963), pages 121-127. ISSN : 0022-3115. DOI : 10.1016/0022-3115(63)90127-2.

[5] **Armstrong W.M. et Irvine W.R.** « Creep of urania base solid solutions ». In : *Journal of Nuclear Materials* 12.3 (1964), pages 261-270. ISSN : 0022-3115. DOI : 10.1016/0022-3115(64)90080-7.

[6] **Armstrong W.M., Irvine W.R. et Martinson R.H.** « Creep deformation of stoichiometric uranium dioxide ». In : *Journal of Nuclear Materials* 7.2 (1962), pages 133-141. ISSN : 0022-3115. DOI : 10.1016/0022-3115(62)90158-7.

[7] **Ashbee K.H.G. et Yust C.S.** « A mechanism for the ease of slip in UO_{2+x} ». In : *Journal of Nuclear Materials* 110.2 (1982), pages 246-250. ISSN : 0022-3115. DOI : 10.1016/0022-3115(82)90152-0.

[8] **Ashby M.F. et Verrall R.A.** « Diffusion-accommodated flow and superplasticity ». In : *Acta Metallurgica* 21.2 (1973), pages 149-163. ISSN : 0001-6160. DOI : 10.1016/0001-6160(73)90057-6.

[9] **Bailly H., Ménessier D. et Prunier C.** *Le combustible nucléaire des réacteurs à eau sous pression et des réacteurs à neutrons rapides : conception et comportement. Collection du Commissariat a l'énergie Atomique.* Eyrolles, 1997.

[10] **Ben Saada M.** « Étude du comportement visco-plastique du dioxyde d'uranium : quantification par analyse EBSD et ECCI des effets liés aux conditions de sollicitation et à la microstructure initiale ». 2017LORR0270. Thèse de doctorat. 2017. URL : http://www.theses.fr/2017LORR0270.

[11] **Blank H. et Ronchi C.** « Lattice defects in the fluorite structure of UO_2, and UO_{2+x} ». In : *International Conference on Plutonium and Other Actinides, 4th Santa Fe, New Mexico.* Sous la direction de N. METALLURGY. Tome 17. Metallurgical Society of AIME, New York. 1970, pages 174-80.

[12] **Bohaboy P.E., Asmoto R.R. et Conti A.E.** *Compressive creep characteristics of stoichiometric uranium dioxide.* Rapport technique. General Electric Co., Sunnyvale, Calif. Breeder Reactor Development Operation, 1969.

[13] **Burton B. et Barnes J.P.** « Creep strain due to stress-enhanced sintering of intergranular cavities ». In : *Metal Science* 9.1 (1975), pages 18-21. DOI : 10.1179/030634575790444397.

[14] **Burton B. et Reynolds G.L.** « The diffusional creep of uranium dioxide : its limitation by interfacial processes ». In : *Acta Metallurgica* 21.8 (1973), pages 1073-1078. ISSN : 0001-6160. DOI : 10.1016/0001-6160(73)90023-0.

[15] **Burton B., Reynolds G.L. et Barnes J.P.** « The influence of grain size on the creep of uranium dioxide ». In : *Journal of Materials Science* 8.12 (1973), pages 1690-1694. DOI : 10.1007/BF02403517.

[16] **Byron J.F.** « The yield and flow of single crystals of uranium dioxide ». In : *Journal of Nuclear Materials* 28.1 (1968), pages 110-114. ISSN : 0022-3115. DOI : 10.1016/0022-3115(68)90062-7.

[17] **Byron J.F.** « Yield and flow of polycrystalline uranium dioxide ». In : *Journal of Nuclear Materials* 27.1 (1968), pages 48-53. ISSN : 0022-3115. DOI : 10.1016/0022-3115(68)90006-8.

[18] **Cagna C.** « Influence des gaz de fission sur l'état mécanique des combustibles oxydes irradiés ». Theses. Ecole nationale supérieure d'arts et métiers - ENSAM, oct. 2016. URL : https://pastel.archives-ouvertes.fr/tel-01451191.

[19] **Canon R.F., Roberts J.T.A. et Beals R.J.** « Deformation of UO_2 at high temperatures ». In : *Journal of the American Ceramic Society* 54.2 (1971), pages 105-112. DOI : 10.1111/j.1151-2916.1971.tb12230.x.

[20] **Castañeda P.P.** « Exact second-order estimates for the effective mechanical properties of nonlinear composite materials ». In : *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 44.6 (1996), pages 827-862. ISSN : 0022-5096. DOI : https://doi.org/10.1016/0022-5096(96)00015-4. URL : https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0022509696000154.

[21] **CEA**. *Code de calcul aux éléments finis Cast3M*. 2020. URL : www-cast3m.cea.fr.

[22] **Chaboche J.L., Kruch S., Maire J.F. et Pottier T.** « Towards a micromechanics based inelastic and damage modeling of composites ». In : *International Journal of Plasticity* 17.4 (2001), pages 411-439. ISSN : 0749-6419. DOI : https://doi.org/10.1016/S0749-6419(00)00056-5.

[23] **Chakraborty P., Tonks M.R. et Pastore G.** « Modeling the influence of bubble pressure on grain boundary separation and fission gas release ». In : *Journal of Nuclear Materials* 452.1 (2014), pages 95-101. ISSN : 0022-3115. DOI : 10.1016/j.jnucmat.2014.04.023.

[24] **Chung T.E. et Davies T.J.** « The low-stress creep of fine-grain uranium dioxide ». In : *Acta Metallurgica* 27.4 (1979), pages 627-635. ISSN : 0001-6160. DOI : 10.1016/0001-6160(79)90014-2.

[25] **Chung T.E. et Davies T.J.** « The superplastic creep of uranium dioxide ». In : *Journal of Nuclear Materials* 79.1 (1979), pages 143-153. ISSN : 0022-3115. DOI : 10.1016/0022-3115(79)90441-0.

[26] **Coble R.L.** « A model for boundary diffusion controlled creep in polycrystalline materials ». In : *Journal of Applied Physics* 34.6 (1963), pages 1679-1682. DOI : 10.1063/1.1702656.

[27] **Coble R.L. et Kingery W.D.** « Effect of porosity on physical properties of sintered alumina ». In : *Journal of the American Ceramic Society* 39.11 (1956), pages 377-385. ISSN : 0022-3115. DOI : 10.1111/j.1151-2916.1956.tb15608.x.

[28] **De Borst R. et Verhoosel C.V.** « Gradient damage vs phase-field approaches for fracture : Similarities and differences ». In : *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 312 (2016). Phase Field Approaches to Fracture, pages 78-94. ISSN : 0045-7825. DOI : 10.1016/j.cma.2016.05.015.

[29] **Dherbey F., Louchet F., Mocellin A. et Leclercq S.** « Elevated temperature creep of polycrystalline uranium dioxide : from microscopic mechanisms to macroscopic behaviour ». In : *Acta Materialia* 50.6 (2002), pages 1495-1505. ISSN : 1359-6454. DOI : 10.1016/S1359-6454(02)00007-1.

[30] **Dvorak G. J.** « Transformation field analysis of inelastic composite materials ». In : *Proceedings of the Royal Society of London. Series A : Mathematical and Physical Sciences* 437.1900 (1992), pages 311-327. DOI : 10.1098/rspa.1992.0063.

[31] **Dvorak G. J. et Benveniste Y.** « On transformation strains and uniform fields in multiphase elastic media ». In : *Proceedings of the Royal Society of London. Series A : Mathematical and Physical Sciences* 437.1900 (1992), pages 291-310. DOI : 10.1098/rspa.1992.0062.

[32] **Evans A.G. et Davidge R.W.** « The strength and fracture of stoichiometric polycrystalline UO_2 ». In : *Journal of Nuclear Materials* 33.3 (1969), pages 249-260. ISSN : 0022-3115. DOI : 10.1016/0022-3115(69)90019-1.

[33] **Francfort G.A. et Marigo J.-J.** « Revisiting brittle fracture as an energy minimization problem ». In : *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 46.8 (1998), pages 1319-1342. ISSN : 0022-5096. DOI : 10.1016/S0022-5096(98)00034-9.

[34] **Frazer D. et Hosemann P.** « Plasticity of UO_2 studied and quantified via elevated temperature micro compression testing ». In : *Journal of Nuclear Materials* 525 (2019), pages 140-144. ISSN : 0022-3115. DOI : 10.1016/j.jnucmat.2019.07.022.

[35] **Fritzen F. et Leuschner M.** « Reduced basis hybrid computational homogenization based on a mixed incremental formulation ». In : *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 260 (2013), pages 143-154. ISSN : 0045-7825. DOI : https://doi.org/10.1016/j.cma.2013.03.007.

[36] **Frost H.J. et Ashby M.F.** *Deformation-mechanism maps : The plasticity and creep of metals and ceramics(Book)*. Oxford, Pergamon Press, 1982, page 175.

[37] **Gatt J.-M.** *Comportement thermo-mécanique du combustible sous irradiation.* Rapport technique. CEA, DEC/SESC/LLCC 04-005, 2004.

[38] **Gelebart L. et Derouillat J.** « AMITEX_FFTP - Simulations FFT massivement parallèles en mécanique des matériaux hétérogènes ». In : *13e colloque national en calcul des structures*. Université Paris-Saclay. Giens, Var, France, 2017. URL : https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01923683.

[39] **Gibbs G.B.** « The role of grain-boundary sliding in high-temperature creep ». In : *Materials Science and Engineering* 2.5 (1968), pages 269-272. ISSN : 0025-5416. DOI : 10.1016/0025-5416(68)90040-2.

[40] **Gridnev A.A., Dzalandinov D.N., Zubarev P.V. et Panov A.S.** « A study of the high-temperature creep in coarse-grained uranium dioxide ». In : *Soviet Atomic Energy* 59.1 (1985), pages 565-568.

[41] **Griffith A.A. et Taylor G.I.** « VI. The phenomena of rupture and flow in solids ». In : *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical or Physical Character* 221.582-593 (1921), pages 163-198. DOI : 10.1098/rsta.1921.0006.

[42] **Guerin Y.** « Étude par compression à hautes températures de la déformation plastique du bioxyde d'uranium polycristallin ». In : *Journal of Nuclear Materials* 56.1 (1975), pages 61-75. ISSN : 0022-3115. DOI : 10.1016/0022-3115(75)90197-X.

[43] **Hall E.O.** « The Deformation and Ageing of Mild Steel : III Discussion of Results ». In : *Proceedings of the Physical Society. Section B* 64.9 (1951), pages 747-753. DOI : 10.1088/0370-1301/64/9/303.

[44] **Hall E.O.** « Variation of Hardness of Metals with Grain Size ». In : *Nature* 173 (1954), pages 948-949. DOI : 10.1038/173948b0.

[45] **Hall R.O.A., Mortimer M.J. et Mortimer D.A.** « Surface energy measurements on UO_2 - A critical review ». In : *Journal of Nuclear Materials* 148.3 (1987), pages 237-256. ISSN : 0022-3115. DOI : 10.1016/0022-3115(87)90017-1.

[46] **Halphen Bernard et Son Nguyen Quoc**. « Sur les matériaux standard généralisés ». In : *Journal de Mécanique* 14.1 (1975), pages 39-63. URL : https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03600755.

[47] **Harris J.E., Tucker M.O. et Greenwood G.W.** « The diffusional creep strain due to the growth of intergranular voids ». In : *Metal Science* 8.1 (1974), pages 311-314. DOI : 10.1179/msc.1974.8.1.311.

[48] **Helfer T.** « Introducing the open-source mfront code generator : Application to mechanical behaviours and material knowledge management within the PLEIADES fuel element modelling platform ». In : *Computers & Mathematics with Applications* 70.5 (2015), pages 994-1023. ISSN : 0898-1221. DOI : 10.1016/j.camwa.2015.06.027.

[49] **Henry R., Zacharie-Aubrun I., Blay T., Chalal S.** « Fracture properties of an irradiated PWR UO_2 fuel evaluated by micro-cantilever bending tests ». In : *Journal of Nuclear Materials* (2020), page 152209. ISSN : 0022-3115. DOI : 10.1016/j.jnucmat.2020.152209.

[50] **Henry R., Zacharie-Aubrun I., Blay T., Tarisien N.** « Irradiation effects on the fracture properties of UO_2 fuels studied by micro-mechanical testing ». In : *Journal of Nuclear Materials* 536 (2020), page 152179. ISSN : 0022-3115. DOI : 10.1016/j.jnucmat.2020.152179.

[51] **Herring C.** « Diffusional viscosity of a polycrystalline solid ». In : *Journal of Applied Physics* 21.5 (1950), pages 437-445. DOI : 10.1063/1.1699681.

[52] **Heuer A.H., Cannon R.M. et Tighe N.J.** « Plastic deformation in fine-grain ceramics ». In : *Ultrafine-Grain Ceramics*. Sous la direction de J. Burke, N. Reed et V. Weiss. Boston, MA : Springer US, 1970, pages 339-365. ISBN : 978-1-4684-2643-4. DOI : 10.1007/978-1-4684-2643-4_16.

[53] **Igata N. et Domoto K.** « Fracture stress and elastic modulus of uranium dioxide including excess oxygen ». In : *Journal of Nuclear Materials* 45.4 (1973), pages 317-322. ISSN : 0022-3115. DOI : 10.1016/0022-3115(73)90165-7.

[54] **Jelea A.** *Synthèse de la recherche bibliographique sur le seuil de rupture de l'*UO_2. Rapport technique. IRSN, 2020.

[55] **Jomard G. et al.** *Spécifications physiques, numériques et informatiques du modèle de comportement des gaz de fission CARACAS pour le traitement des combustibles.* Rapport technique. NT-DEC-SESC-LSC 11-011 Indice 2, 2014.

[56] **Keller R.J., Mitchell T.E. et Heuer A.H.** « Plastic deformation in nonstoichiometric UO_{2+x} single crystals—I. Deformation at low temperatures ». In : *Acta Metallurgica* 36.4 (1988), pages 1061-1071. ISSN : 0001-6160. DOI : 10.1016/0001-6160(88)90160-5.

[57] **Keller R.J., Mitchell T.E. et Heuer A.H.** « Plastic deformation in nonstoichiometric UO_{2+x} single crystals—II. Deformation at high temperatures ». In : *Acta Metallurgica* 36.4 (1988), pages 1073-1083. ISSN : 0001-6160. DOI : 10.1016/0001-6160(88)90161-7.

[58] **Knezevic M.** « Modeling mechanical response and texture evolution of α-uranium as a function of strain rate and temperature using polycrystal plasticity ». In : *International Journal of Plasticity* 43 (2013). IJP, pages 70-84.

[59] **Knorr D.B., Cannon R.M. et Coble R.L.** « Overview no. 84 : An analysis of diffusion and diffusional creep in stoichiometric and hyperstoichiometric uranium dioxide ». In : *Acta Metallurgica* 37.8 (1989), pages 2103-2123. ISSN : 0001-6160. DOI : 10.1016/0001-6160(89)90136-3.

[60] **Kocks U.F., Argon A.S. et Aahby M.F.** *Progress in Material Science Vol. 19 : Thermodynamics and Kinetics of Slip*. Sous la direction de B. CHALMERS, J. CHRISTIAN et T. MASSALSKI. 1975.

[61] **Largenton R.** *Étude en base du comportement et de la localisation des gaz de fission au sein des pastilles* UO_2 *REP afin d'initialiser numériquements des études accidentelles (RIA-LOCA-etc.)* Rapport technique. Électricité De France - R&D MMC, 2019.

[62] **Largenton R., Michel J.-C. et Suquet P.** « Extension of the nonuniform transformation field analysis to linear viscoelastic composites in the presence of aging and swelling ». In : *Mechanics of Materials* 73 (2014), pages 76-100.

[63] **Lefebvre J.-M.** *Plastic deformation behavior of a fluorite ceramic material : uranium dioxide*. Rapport technique. CEA Centre d'Études Nucléaires de Fontenay-aux-Roses, 1977. URL : https://inis.iaea.org/collection/NCLCollectionStore/_Public/08/340/8340267.pdf.

[64] **Leturcq B., Le Tallec P., Pascal S., Fandeur O. et Lamorte N.** « A new reduced order model to represent the creep induced fuel assembly bow in PWR cores ». In : *Nuclear Engineering and Design* 394 (2022), page 111828. ISSN : 0029-5493. DOI : https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2022.111828.

[65] **Levenberg K.** « A method for the solution of certain non-linear problems in least squares ». In : *Quarterly of applied mathematics* 2.2 (1944), pages 164-168.

[66] **Marquardt D.W.** « An algorithm for least-squares estimation of nonlinear parameters ». In : *Journal of the society for Industrial and Applied Mathematics* 11.2 (1963), pages 431-441.

[67] **Martin D.G.** « The thermal expansion of solid UO_2 and (U, Pu) mixed oxides - a review and recommendations ». In : *Journal of Nuclear Materials* 152.2 (1988), pages 94-101. ISSN : 0022-3115. DOI : 10.1016/0022-3115(88)90315-7.

[68] **Matthews J.R.** « Mechanical properties and diffusion data for carbide and oxide fuels. Ceramic data contribution ». In : *Atomic Energy Research Establishment, Harwell, UKEA, AERE-M* 2643 (1974).

[69] **Michel J.-C., Moulinec H. et Suquet P.** « Effective properties of composite materials with periodic microstructure : a computational approach ». In : *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 172.1 (1999), pages 109-143. ISSN : 0045-7825. DOI : https://doi.org/10.1016/S0045-7825(98)00227-8.

[70] **Michel J.-C. et Suquet P.** « The constitutive law of nonlinear viscous and porous materials ». In : *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 4.40 (1992), pages 783-812.

[71] **Michel J.-C. et Suquet P.** « Nonuniform transformation field analysis ». In : *International Journal of Solids and Structures* 40.25 (2003). Special issue in Honor of George J. DVORAK, pages 6937-6955. ISSN : 0020-7683. DOI : https://doi.org/10.1016/S0020-7683(03)00346-9.

[72] **Michel J.-C. et Suquet P.** « Non-uniform transformation field analysis : a reduced model for multiscale non-linear problems in solid mechanics ». In : *Multiscale Modeling In Solid Mechanics : Computational Approaches*. World Scientific, 2010, pages 159-206. DOI : 10.1142/9781848163089_0004.

[73] **Michel J.-C. et Suquet P.** « A model-reduction approach in micromechanics of materials preserving the variational structure of constitutive relations ». In : *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 90 (2016), pages 254-285.

[74] **Michel J.-C. et Suquet P.** « A model-reduction approach to the micromechanical analysis of polycrystalline materials ». In : *Computational Mechanics* 57.3 (2016), pages 483-508. DOI : 10.1007/s00466-015-1248-9.

[75] **Michel J.-C. et Suquet P.** « Effective potentials in nonlinear polycrystals and quadrature formulae ». In : *Proceedings of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 473.2204 (2017), page 20170213. DOI : 10.1098/rspa.2017.0213.

[76] **Michel J.C., Galvanetto U. et Suquet P.** « Constitutive relations involving internal variables based on a micromechanical analysis ». In : *Continuum Thermomechanics : The Art and Science of Modelling Material Behaviour*. Dordrecht : Springer Netherlands, 2000, pages 301-312. DOI : 10.1007/0-306-46946-4_23.

[77] **Moal A.** *SCANAIR reference documentation,* versionV − 7 − 1*, revision 2446*. IRSN. Jan. 2011.

[78] **Mohamed F.A. et Soliman M.S.** « On the creep behavior of uranium dioxide ». In : *Materials Science and Engineering* 53.2 (1982), pages 185-190. ISSN : 0025-5416. DOI : 10.1016/0025-5416(82)90051-9.

[79] **Monerie Y. et Gatt J.M.** « Overall viscoplastic behavior of non-irradiated porous nuclear ceramics ». In : *Mechanics of Materials* 7.38 (2006), pages 608-619.

[80] **Mordike B.L.** « Yield and flow of single crystals of uranium dioxide ». In : *Journal of Nuclear Materials* 60.2 (1976), pages 223-226. ISSN : 0022-3115. DOI : 10.1016/0022-3115(76)90169-0.

[81] **Nabarro F.R.N.** « Report of a Conference on the Strength of Solids ». In : *The Physical Society, London* 75 (1948).

[82] **Nadeau J.S.** « Dependence of flow stress on nonstoichiometry in oxygen-rich uranium dioxide at high temperatures ». In : *Journal of the American Ceramic Society* 52.1 (1969), pages 1-7. DOI : 10.1111/j.1151-2916.1968.tb11863.x-i1.

[83] **Nkoumbou Kaptchouang N.B.** « Modélisation micromécanique de l'endommagement ductile par une approche cohésive-volumique : application à l'UO_2 irradié. » Thèse de doctorat. 2019.

[84] **Noirot L.** *MARGARET : description physique et numérique du modèle de gaz applicable à chaque milieu homogène d'un combustible* UO_2 *ou MOX*. Rapport technique. NT SESC/LSC 04-040 Indice 0, 2005.

[85] **Oguma M.** « Microstructure effects on fracture strength of UO_2 fuel pellets ». In : *Journal of Nuclear Science and Technology* 19.12 (1982), pages 1005-1014. DOI : 10.1080/18811248.1982.9734249.

[86] **Pacull J.** « Modèle numérique micro-mécanique d'agrégat polycristallin pour le comportement des combustibles oxydes ». Theses. Université de Provence - Aix-Marseille I, 2011. URL : https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00720837.

[87] **Papin J.** *Synthesis of the CABRI REP-Na programme*. Rapport technique. IRSN, 2003.

[88] **Passmore E., Moschetti A. et Vasilos T.** « The brittle-ductile transition in polycrystalline aluminium oxide ». In : *The philosophical Magazine : A Journal of Theoritical Experimental and Applied Physics* 13.126 (1966), pages 1157-1162. DOI : 10.1016/14786436608213531.

[89] **Peierls R.** « The size of a dislocation ». In : *Proceedings of the Physical Society* 52.1 (1940), pages 34-37. DOI : 10.1088/0959-5309/52/1/305.

[90] **Petch N.J.** « The cleavage strength of polycrystals ». In : *Journal of the Iron and Steel Institute* 174 (1953), pages 25-28.

[91] **Portelette L.** « Analyse des mécanismes de glissement des dislocations dans l'UO_2 à l'aide de la modélisation multi-échelles comparée à l'expérience ». 2018AIXM0406. Thèse de doctorat. 2018. URL : http://www.theses.fr/2018AIXM0406.

[92] **Radford K.C.** « Effect of fabrication parameters and microstructure on the mechanical strength of UO_2 fuel pellets ». In : *Journal of Nuclear Materials* 84.1 (1979), pages 222-236. ISSN : 0022-3115. DOI : 10.1016/0022-3115(79)90165-X.

[93] **Radford K.C. et Terwilliger G.R.** « Compressive deformation of polycrystalline dioxyde uranium UO_2 ». In : *Journal of the American Ceramic Society* 58.7-8 (1975), pages 274-278. DOI : 10.1111/j.1151-2916.1975.tb11474.x.

[94] **Raj R. et Ashby M.F.** « On grain boundary sliding and diffusional creep ». In : *Metallurgical transactions* 2.4 (1971), pages 1113-1127.

[95] **Rapperport E.J. et Huntress A.M.** *Deformation modes of single crystal uranium dioxide from* 700 [°C] *to* 1900 [°C]. Tome 1242. United States Atomic Energy Commission, Office of Technical Information, 1960.

[96] **Reynolds G.L., Burton B. et Speight M.V.** « Creep fracture processes in uranium dioxide ». In : *Acta Metallurgica* 23.5 (1975), pages 573-577. ISSN : 0001-6160. DOI : 10.1016/0001-6160(75)90097-8.

[97] **Roberts J.T.A.** « High-Temperature plasticity of oxide nuclear fuel ». In : *Deformation of Ceramic Materials*. Sous la direction de R. Bradt et R. Tressler. Boston, MA : Springer US, 1975, pages 325-338. ISBN : 978-1-4613-4431-5. DOI : 10.1007/978-1-4613-4431-5_17.

[98] **Roberts J.T.A. et Ueda Y.** « Influence of porosity on deformation and fracture of UO_2 ». In : *Journal of the American Ceramic Society* 55.3 (1972), pages 117-124. DOI : 10.1111/j.1151-2916.1972.tb11233.x.

[99] **Roberts J.T.A. et Wrona B.J.** « Nature of brittle-to-ductile transition UO_2 - 20 $wt\%PuO_2$ nuclear fuel ». In : *Journal of Nuclear Materials* 41.1 (1971), pages 23-38. ISSN : 0022-3115. DOI : 10.1016/0022-3115(71)90196-6.

[100] **Roussette S., Michel J.C. et Suquet P.** « Nonuniform transformation field analysis of elastic–viscoplastic composites ». In : *Composites Science and Technology* 69.1 (2009). Mechanical Response of Fibre Reinforced Composites, pages 22-27. ISSN : 0266-3538. DOI : https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2007.10.032.

[101] **Salvo M.** « Etude expérimentale et modélisation du comportement mécanique du combustible UO_2 en compression à haute température et forte vitesse de sollicitation ». 2014AIXM4771. Thèse de doctorat. 2014. URL : http://www.theses.fr/2014AIXM4771.

[102] **Sauter F. et Leclercq S.** « Modeling of the non-monotonous viscoplastic behavior of uranium dioxide ». In : *Journal of Nuclear Materials* 322.1 (2003), pages 1-14. ISSN : 0022-3115. DOI : 10.1016/S0022-3115(03)00276-9.

[103] **Sawbridge P.T. et Sykes E.C.** « Dislocation glide in UO_2 single crystals at 1600 [K] ». In : *The Philosophical Magazine : A Journal of Theoretical Experimental and Applied Physics* 24.187 (1971), pages 33-53. DOI : 10.1080/14786437108216422.

[104] **Scott R., Hall A.R. et Williams J.** « The plastic deformation of uranium oxides above 800 [°C] ». In : *Journal of Nuclear Materials* 1.1 (1959), pages 39-48. ISSN : 0022-3115. DOI : 10.1016/0022-3115(59)90009-1.

[105] **Seeger A.** « LXV. On the theory of the low-temperature internal friction peak observed in metals ». In : *The Philosophical Magazine : A Journal of Theoretical Experimental and Applied Physics* 1.7 (1956), pages 651-662. DOI : 10.1080/14786435608244000.

[106] **Seltzer M.S., Clauer A.H. et Wilcox B.A.** « The influence of stoichiometry on compression creep of polycrystalline UO_{2+x} ». In : *Journal of Nuclear Materials* 44.3 (1972), pages 331-336. ISSN : 0022-3115. DOI : 10.1016/0022-3115(72)90044-X.

[107] **Seltzer M.S., Clauer A.H. et Wilcox B.A.** « The influence of stoichiometry on compression creep of uranium dioxide single crystals ». In : *Journal of Nuclear Materials* 44.1 (1972), pages 43-56. ISSN : 0022-3115. DOI : 10.1016/0022-3115(72)90127-4.

[108] **Sercombe J.** *Dossier de présentation et de validation des schémas de calcul d'ALCYONE* V1.4 *pour l'*UO_2 *- Indice 0*. CEA. Sept. 2017.

[109] **Sharma L., Peerlings R.H.J., Shantraj P., Roters F. et Geers M.G.D.** « An FFT-based spectral solver for interface decohesion modelling using a gradient damage approach ». In : *Computational Mechanics* 65 (avr. 2020), pages 925-939. DOI : 10.1007/s00466-019-01801-4.

[110] **Skelton R. et Walker A.M.** « Peierls-Nabarro modeling of dislocations in UO_2 ». In : *Journal of Nuclear Materials* 495 (2017), pages 202-210. ISSN : 0022-3115. DOI : 10.1016/j.jnucmat.2017.08.024.

[111] **Slagle O.D.** « Deformation behavior of UO_2 above 2000 [$°C$]. » In : *Journal of the American Ceramic Society* 67.3 (1984), pages 169-173. DOI : 10.1111/j.1151-2916.1984.tb19735.x.

[112] **Solomon A.A., Yust C.S. et Packan N.H.** « Primary creep of UO_2 and the effect of amorphous grain boundary phases ». In : *Journal of Nuclear Materials* 110.2 (1982), pages 333-342. ISSN : 0022-3115. DOI : 10.1016/0022-3115(82)90163-5.

[113] **Soulacroix J.** « Approche micromécanique du comportement du combustible dioxyde d'uranium ». 2014ENAM0032. Thèse de doctorat. 2014. URL : http://www.theses.fr/2014ENAM0032.

[114] **Soulie A.** « Atomistically-informed thermal glide model for edge dislocation in uranium dioxide ». In : *Acta Materiala* 150 (2018), pages 248-261. ISSN : 1359-6454. DOI : 10.1016/j.actamat.2018.03.024.

[115] **Sung P. et Turbaugh J.E.** « Calculation of the temperature-dependent shear modulus of UO_2 ». In : *Journal of Nuclear MAterials* 24.1 (1967), pages 107-108. ISSN : 0022-3115. DOI : 10.1016/0022-3115(67)90088-8.

[116] **Tachibana T., Furuya H. et Koizumi M.** « Dependence on strain rate and temperature shown by yield stress of uranium dioxide ». In : *Journal of Nuclear Science and Technology* 13.9 (1976), pages 497-502. DOI : 10.1080/18811248.1976.9734063.

[117] **Tachibana T., Furuya H. et Koizumi M.** « Effect of temperature and deformation rate on fracture strength of sintered uranium dioxide ». In : *Journal of Nuclear Science and Technology* 16.4 (1979), pages 266-277. DOI : 10.1080/18811248.1979.9730900.

[118] **Tottle C.R.** *Mechanical properties of uranium compounds*. Tome 7070. Argonne National Laboratory, 1965.

[119] **Vitovec F.H.** « Cavity growth and creep rate taking into account the change of net stress ». In : *Journal Materials Science* 7 (1972), pages 615-620. ISSN : 1573-4803. DOI : 10.1007/BF00549372.

[120] **Werner P. et Routbort J.L.** « Effect of pore shape on the fracture of UO_2 up to high strain rates ». In : *Journal of Nuclear Materials* 113.1 (1983), pages 118-121. DOI : 10.1016/0022-3115(83)90172-1.

[121] **White R.J.** « The development of grain-face porosity in irradiated oxide fuel ». In : *Journal of Nuclear Materials* 325.1 (2004), pages 61-77. ISSN : 0022-3115. DOI : https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2003.10.008.

[122] **Yust C.S. et McHargue C.J.** « Dislocation substructures in deformed uranium dioxide single crystals ». In : *Journal of Nuclear Materials* 31.2 (1969), pages 121-137. ISSN : 0022-3115. DOI : 10.1016/0022-3115(69)90187-1.

[123] **Yust C.S. et McHargue C.J.** « Deformation of hyperstoichiometric UO_2 single crystals ». In : *Journal of the American Ceramic Society* 54.12 (1971), pages 628-635. DOI : 10.1111/j.1151-2916.1971.tb16019.x.

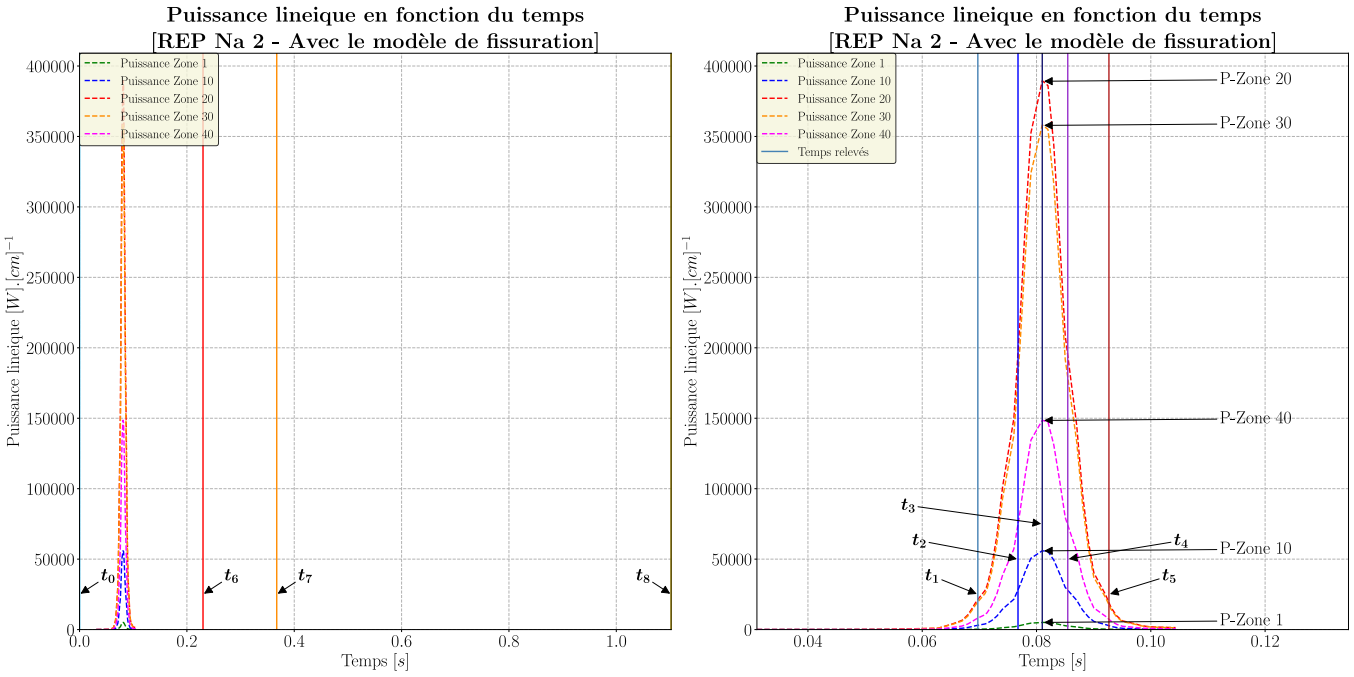
[124] **Yust C.S. et McHargue C.J.** « Model for the deformation of hyperstoichiometric UO_2 ». In : *Journal of the American Ceramic Society* 56.3 (1973), pages 161-164. DOI : 10.1111/j.1151-2916.1973.tb15434.x.

[125] **Yust C.S. et Roberts J.T.A.** « On the observation of lattice and grain boundary dislocations in UO_2 deformed at high temperatures ». In : *Journal of Nuclear Materials* 48.3 (1973), pages 317-329. ISSN : 0022-3115. DOI : 10.1016/0022-3115(73)90028-7.

Annexes

A Partie I Chapitre I - Compléments des simulations des essais REP-Na : simulations des essais REP-Na 2-3-4 en condition accidentelle de type RIA avec le code de simulation numérique SCANAIR

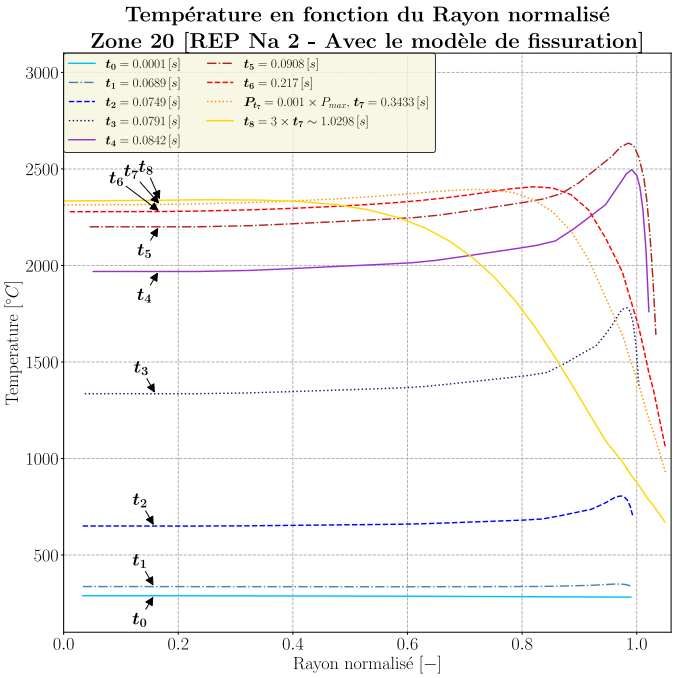
A.1 Simulation de l'essai REP-Na 2



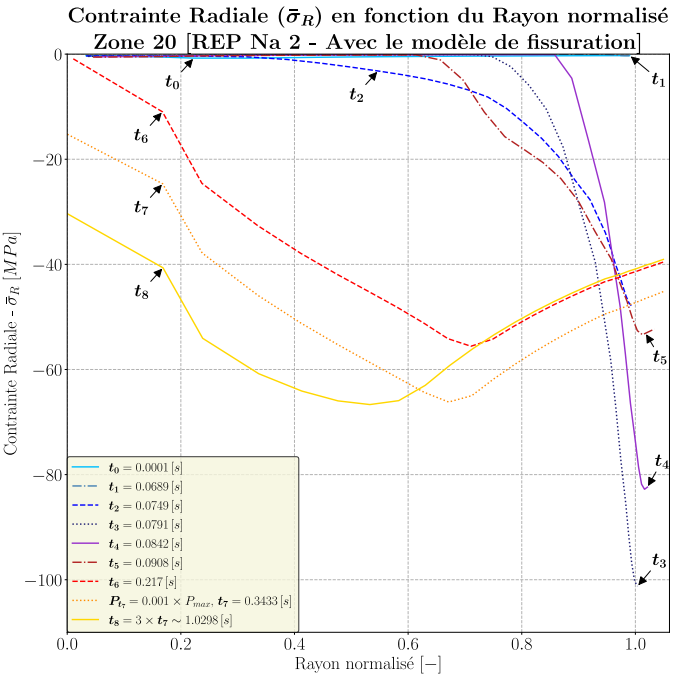
(a) Vue globale de l'évolution de la puissance en fonction du temps.

(b) Agrandissement de la zone du pulse de puissance.

FIGURE A.1 – Essai RIA REP-Na 2 : Graphiques représentant la puissance en fonction du temps et ce pour différentes zones axiales du crayon combustible étudiés - Simulations SCANAIR.

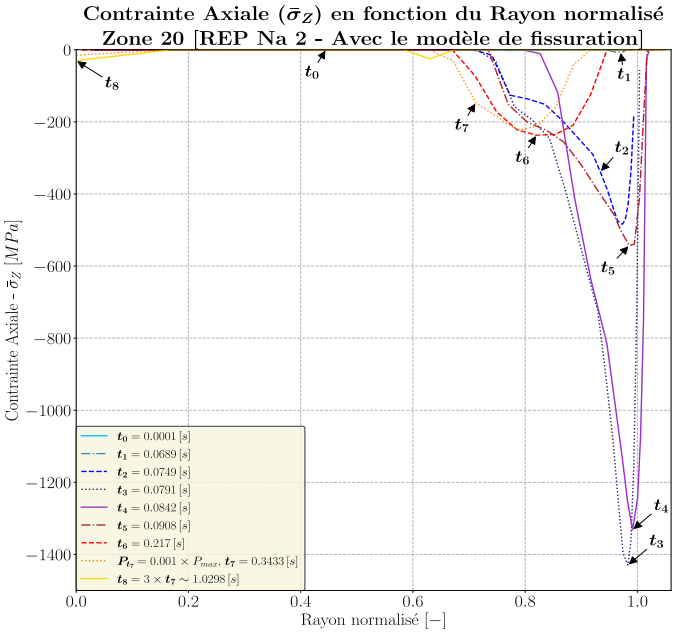


(a) Profil de température à différents temps.

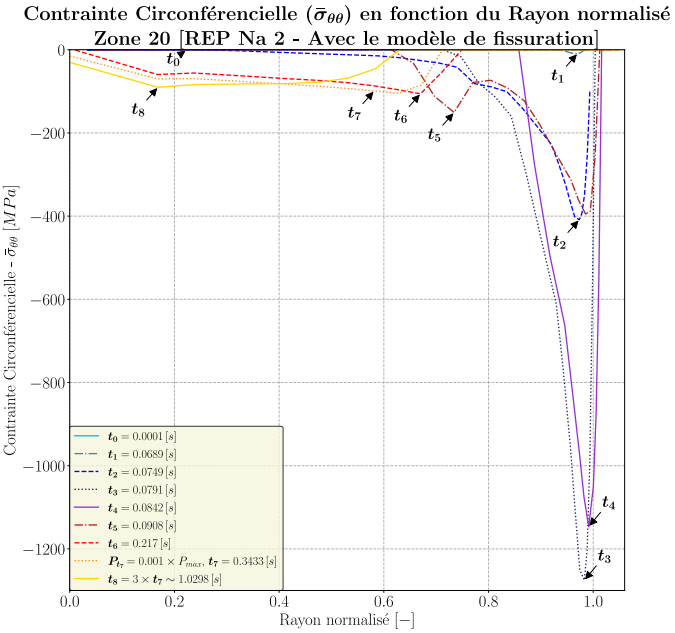


(b) Contrainte radiale $\bar{\sigma}_R$.

FIGURE A.2 – Essai RIA REP-Na 2 : Graphiques représentant la température et la contrainte radiale en fonction du rayon normalisé de la pastille UO_2 pour la zone axiale centrale du crayon (Zone 20) et ce à plusieurs temps - Simulations SCANAIR.



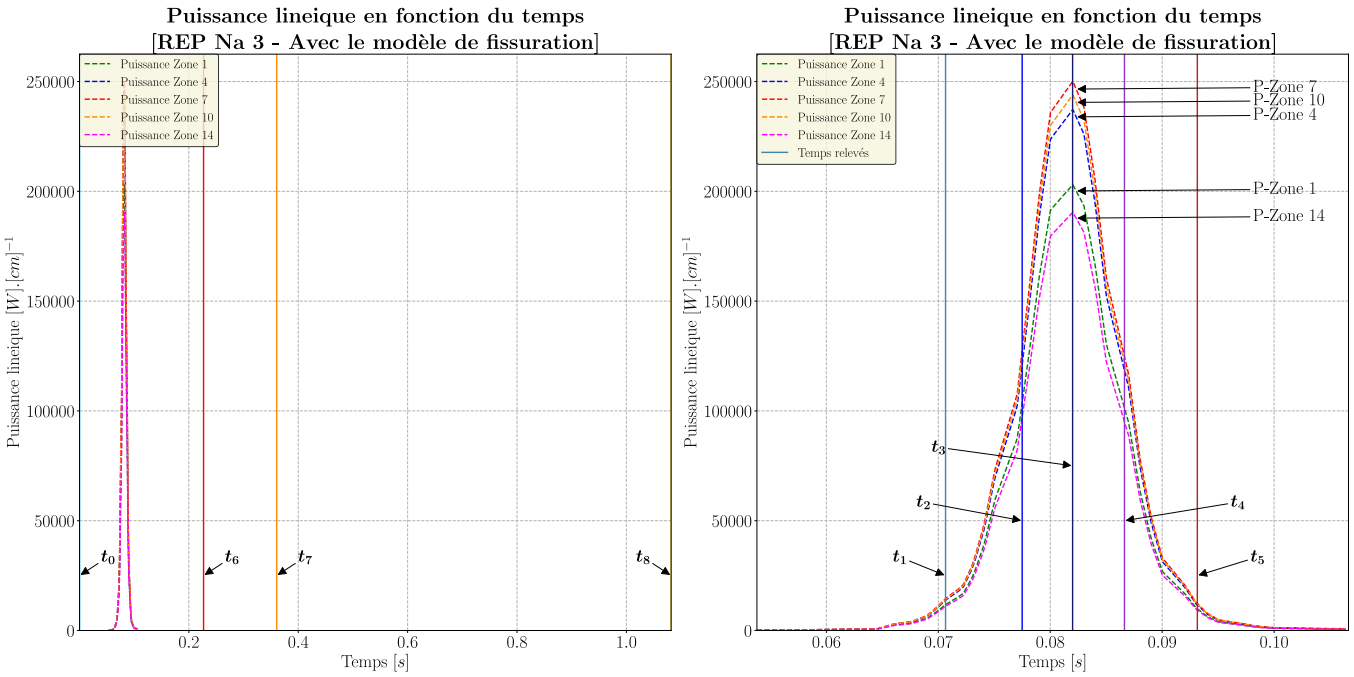
(a) Contrainte axiale $\bar{\sigma}_Z$.



(b) Contrainte circonférentielle $\bar{\sigma}_{\theta\theta}$.

FIGURE A.3 – Essai RIA REP-Na 2 : Graphiques représentant les contraintes axiale et circonférentielle en fonction du rayon normalisé de la pastille UO_2 pour la zone axiale centrale du crayon (Zone 20) et ce à plusieurs temps - Simulations SCANAIR.

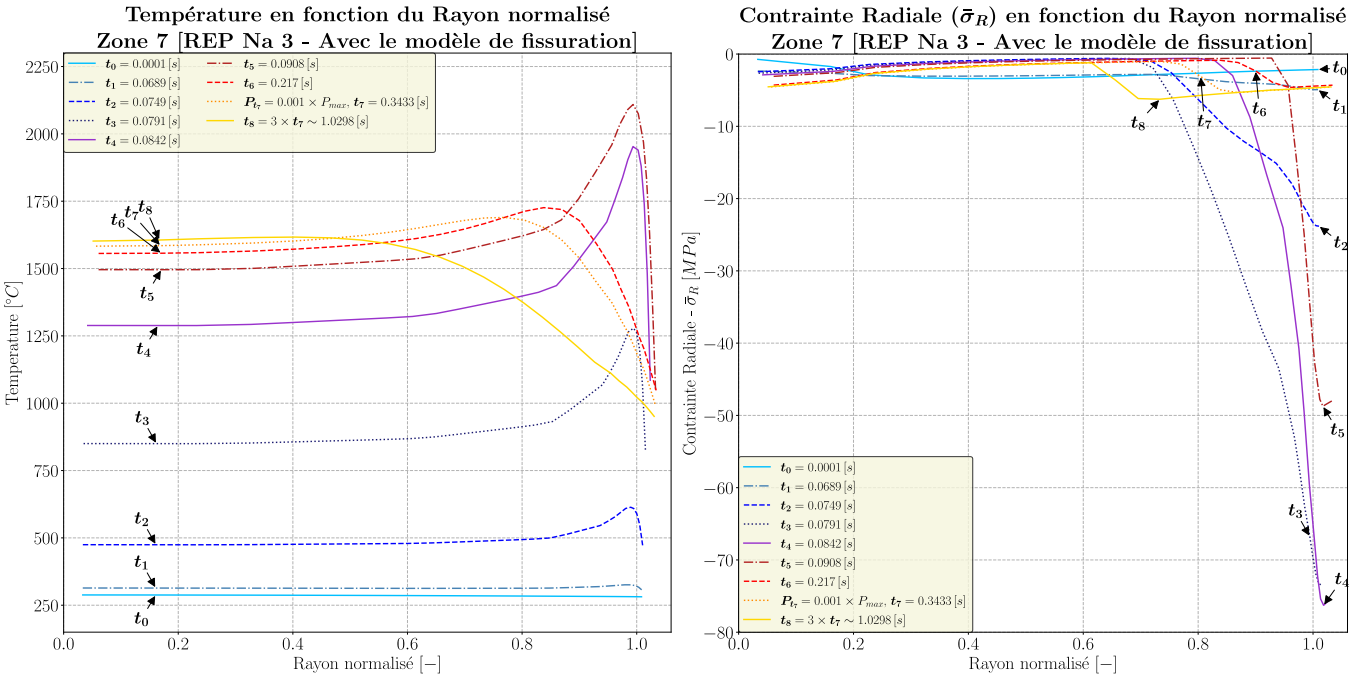
A.2 Simulation de l'essai REP-Na 3



(a) Vue globale de l'évolution de la puissance en fonction du temps.

(b) Agrandissement de la zone du pulse de puissance.

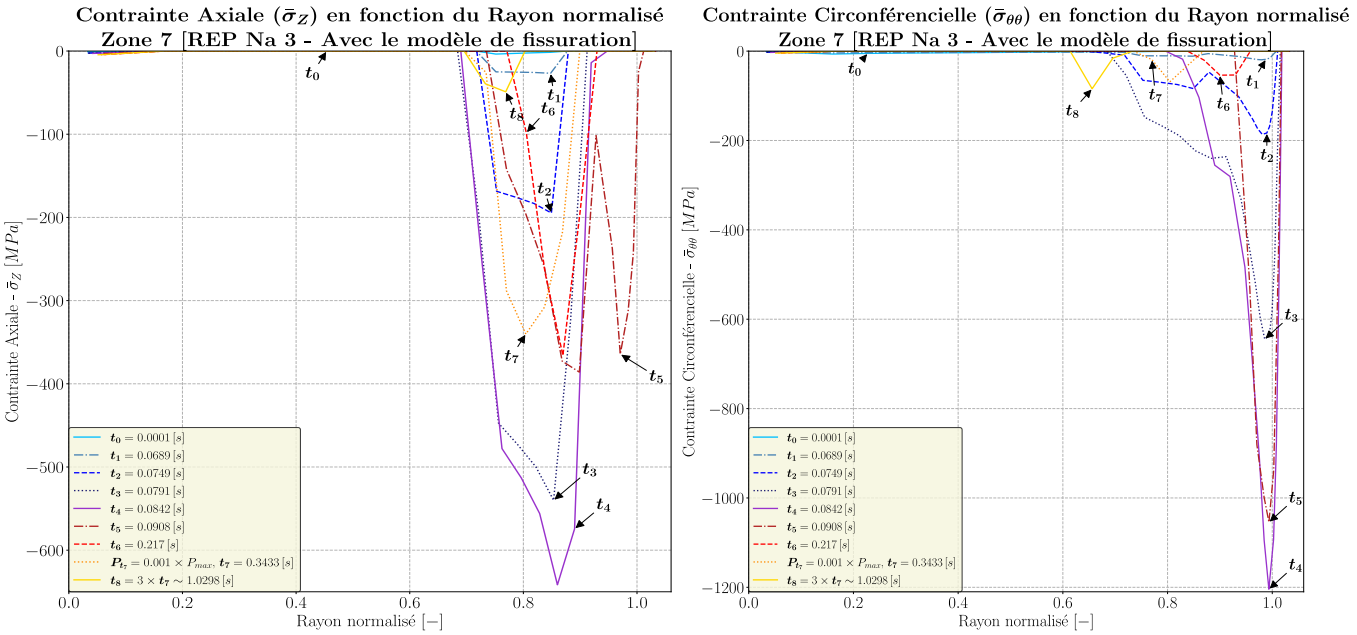
FIGURE A.4 – Essai RIA REP-Na 3 : Graphiques représentant la puissance en fonction du temps et ce pour différentes zones axiales du crayon combustible étudiés - Simulations SCANAIR.



(a) Profil de température à différents temps.

(b) Contrainte radiale $\bar{\sigma}_R$.

FIGURE A.5 – Essai RIA REP-Na 3 : Graphiques représentant la température et la contrainte radiale en fonction du rayon normalisé de la pastille UO_2 pour la zone axiale centrale du crayon (Zone 7) et ce à plusieurs temps - Simulations SCANAIR.

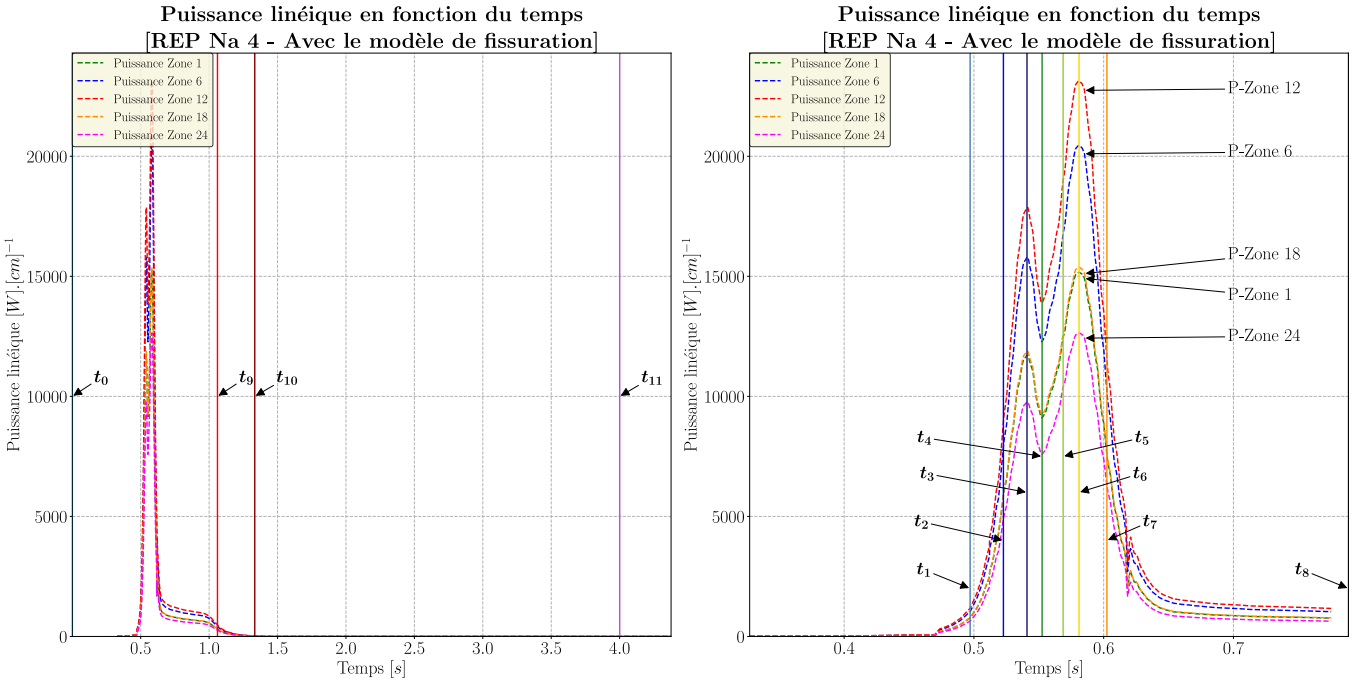


(a) Contrainte axiale $\bar{\sigma}_Z$.

(b) Contrainte circonférentielle $\bar{\sigma}_{\theta\theta}$.

FIGURE A.6 – Essai RIA REP-Na 3 : Graphiques représentant les contraintes axiale et circonférentielle en fonction du rayon normalisé de la pastille UO_2 pour la zone axiale centrale du crayon (Zone 7) et ce à plusieurs temps - Simulations SCANAIR.

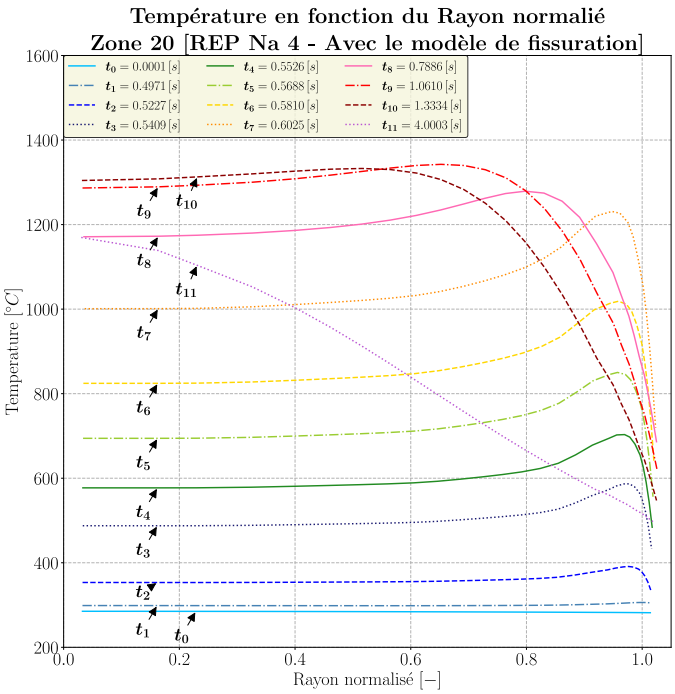
A.3 Simulation de l'essai REP-Na 4



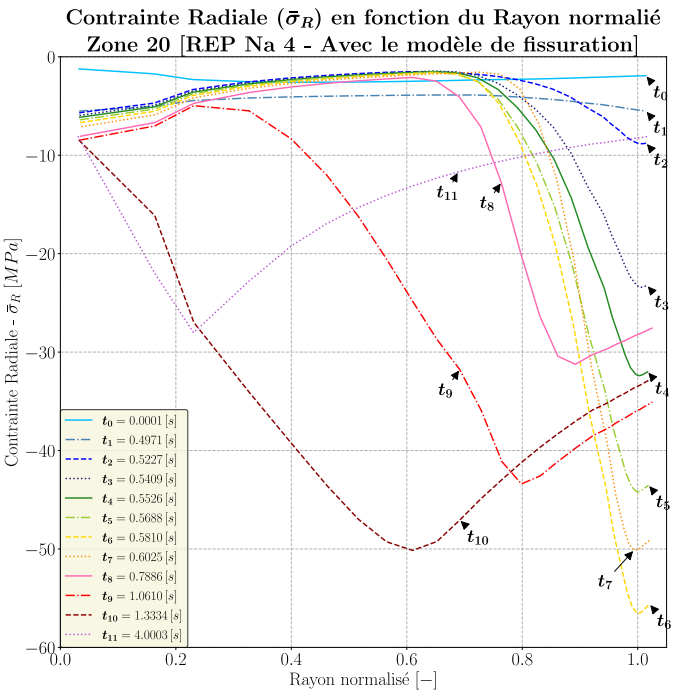
(a) Vue globale de l'évolution de la puissance en fonction du temps.

(b) Agrandissement de la zone du pulse de puissance.

FIGURE A.7 – Essai RIA REP-Na 4 : Graphiques représentant la puissance en fonction du temps et ce pour différentes zones axiales du crayon combustible étudiés - Simulations SCANAIR.

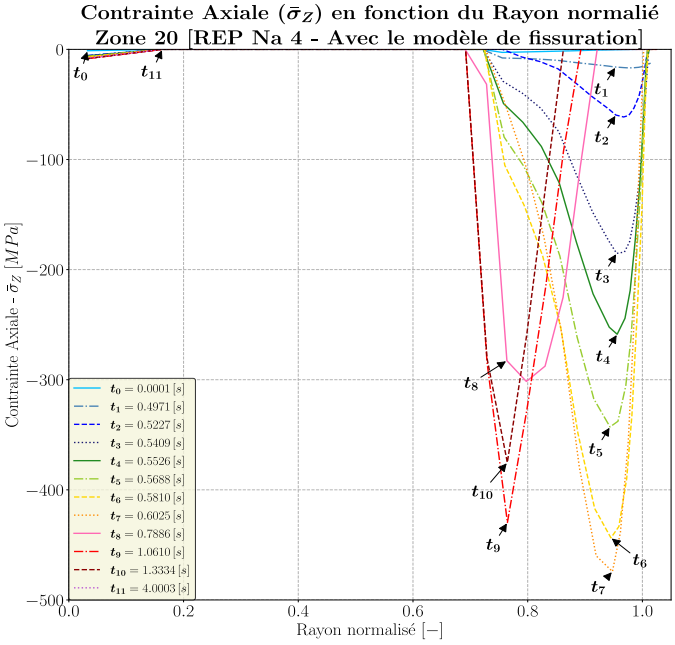


(a) Profil de température à différents temps.

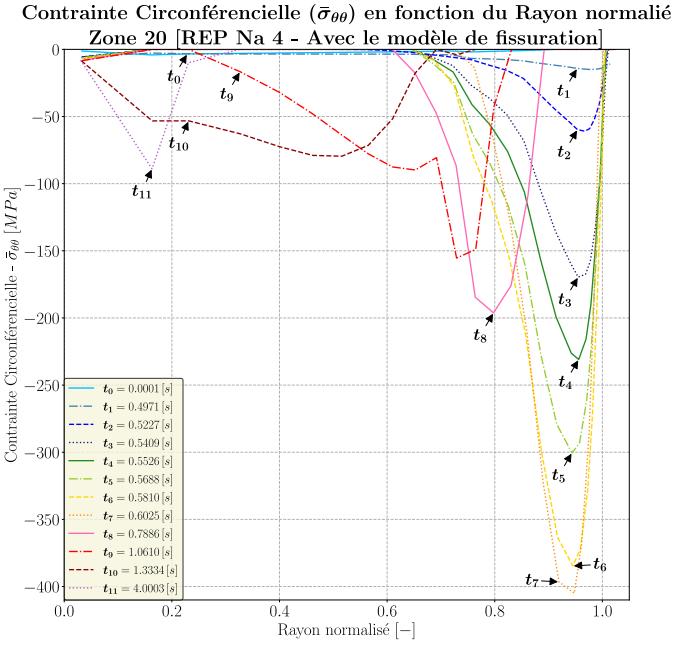


(b) Contrainte radiale $\bar{\sigma}_R$.

FIGURE A.8 – Essai RIA REP-Na 4 : Graphiques représentant la température et la contrainte radiale en fonction du rayon normalisé de la pastille UO_2 pour la zone axiale centrale du crayon (Zone 20) et ce à plusieurs temps - Simulations SCANAIR.



(a) Contrainte axiale $\bar{\sigma}_Z$.



(b) Contrainte circonférentielle $\bar{\sigma}_{\theta\theta}$.

FIGURE A.9 – Essai RIA REP-Na 4 : Graphiques représentant les contraintes axiale et circonférentielle en fonction du rayon normalisé de la pastille UO_2 pour la zone axiale centrale du crayon (Zone 20) et ce à plusieurs temps - Simulations SCANAIR.

B Partie I Chapitre II - Compléments sur les essais macroscopiques dont la vitesse de déformation se rapproche des conditions accidentelles d'insertion de réactivité [Salvo 2014]

B.1 Pente d'écrouissage apparent en fonction de la vitesse de déformation, de la température et de la densité

Lot Faible densité $\rho \sim 96.4 \pm 0.3\,\%$				
	$T = 1100\,[°C]$	$T = 1350\,[°C]$	$T = 1550\,[°C]$	$T = 1700\,[°C]$
$\dot{\bar{\varepsilon}} = 10^{-1}\,[s]^{-1}$	$p_{\text{ecrou}} \sim 8.44\,[MPa].[\%]^{-1}$	$p_{\text{ecrou}} \sim 3.16\,[MPa].[\%]^{-1}$	$p_{\text{ecrou}} \sim 2.22\,[MPa].[\%]^{-1}$	$p_{\text{ecrou}} \sim 1.39\,[MPa].[\%]^{-1}$
$\dot{\bar{\varepsilon}} = 10^{-2}\,[s]^{-1}$	$p_{\text{ecrou}} \sim 10.02\,[MPa].[\%]^{-1}$	$p_{\text{ecrou}} \sim 3.03\,[MPa].[\%]^{-1}$	$p_{\text{ecrou}} \sim 1.49\,[MPa].[\%]^{-1}$	$p_{\text{ecrou}} \sim 0.99\,[MPa].[\%]^{-1}$
$\dot{\bar{\varepsilon}} = 10^{-3}\,[s]^{-1}$	$p_{\text{ecrou}} \sim 5.73\,[MPa].[\%]^{-1}$	$p_{\text{ecrou}} \sim 1.16\,[MPa].[\%]^{-1}$	$p_{\text{ecrou}} \sim 0.90\,[MPa].[\%]^{-1}$	$p_{\text{ecrou}} \sim 0.42\,[MPa].[\%]^{-1}$
$\dot{\bar{\varepsilon}} = 10^{-4}\,[s]^{-1}$	$p_{\text{ecrou}} \sim 3.30\,[MPa].[\%]^{-1}$	$p_{\text{ecrou}} \sim 1.02\,[MPa].[\%]^{-1}$	$p_{\text{ecrou}} \sim 0.43\,[MPa].[\%]^{-1}$	$p_{\text{ecrou}} \sim 0.12\,[MPa].[\%]^{-1}$
Lot Forte densité $\rho \sim 98.1 \pm 0.3\,\%$				
$\dot{\bar{\varepsilon}} = 10^{-4}\,[s]^{-1}$	$p_{\text{ecrou}} \sim 5.45\,[MPa].[\%]^{-1}$	$p_{\text{ecrou}} \sim 4.59\,[MPa].[\%]^{-1}$	$p_{\text{ecrou}} \sim 0.64\,[MPa].[\%]^{-1}$	$p_{\text{ecrou}} \sim 0.\,[MPa].[\%]^{-1}$
$\dot{\bar{\varepsilon}} = 10^{-3}\,[s]^{-1}$	$p_{\text{ecrou}} \sim -\,[MPa].[\%]^{-1}$	$p_{\text{ecrou}} \sim 5.37\,[MPa].[\%]^{-1}$	$p_{\text{ecrou}} \sim 4.22\,[MPa].[\%]^{-1}$	$p_{\text{ecrou}} \sim 0.76\,[MPa].[\%]^{-1}$
$\dot{\bar{\varepsilon}} = 10^{-2}\,[s]^{-1}$	$p_{\text{ecrou}} \sim -\,[MPa].[\%]^{-1}$	$p_{\text{ecrou}} \sim 6.44\,[MPa].[\%]^{-1}$	$p_{\text{ecrou}} \sim 5.87\,[MPa].[\%]^{-1}$	$p_{\text{ecrou}} \sim 2.62\,[MPa].[\%]^{-1}$
$\dot{\bar{\varepsilon}} = 10^{-1}\,[s]^{-1}$	$p_{\text{ecrou}} \sim -\,[MPa].[\%]^{-1}$	$p_{\text{ecrou}} \sim 7.45\,[MPa].[\%]^{-1}$	$p_{\text{ecrou}} \sim 2.69\,[MPa].[\%]^{-1}$ Décohésion JdG Observée	$p_{\text{ecrou}} \sim 2.72\,[MPa].[\%]^{-1}$ Décohésion JdG Observée

TABLEAU B.1 – Tableau récapitulant les pentes d'écrouissages des différents essais expérimentaux menés [**Salvo 2014**].

B.2 Contrainte « d'entrée » en plasticité en fonction de la vitesse de déformation, de la température et de la densité

	$T = 1100\,[°C]$	$T = 1350\,[°C]$	$T = 1550\,[°C]$	$T = 1700\,[°C]$
Lot Faible densité $\rho \sim 96.4 \pm 0.3\,\%$				
$\dot{\bar{\varepsilon}} = 10^{-1}\,[s]^{-1}$	$\bar{\sigma}^{th}_{vp\text{-}el} \sim 190.2\,[MPa]$	$\bar{\sigma}^{th}_{vp\text{-}el} \sim 126.4\,[MPa]$	$\bar{\sigma}^{th}_{vp\text{-}el} \sim 101.6\,[MPa]$	$\bar{\sigma}^{th}_{vp\text{-}el} \sim 90.2\,[MPa]$
$\dot{\bar{\varepsilon}} = 10^{-2}\,[s]^{-1}$	$\bar{\sigma}^{th}_{vp\text{-}el} \sim 155.5\,[MPa]$	$\bar{\sigma}^{th}_{vp\text{-}el} \sim 111.8\,[MPa]$	$\bar{\sigma}^{th}_{vp\text{-}el} \sim 92.1\,[MPa]$	$\bar{\sigma}^{th}_{vp\text{-}el} \sim 79.2\,[MPa]$
$\dot{\bar{\varepsilon}} = 10^{-3}\,[s]^{-1}$	$\bar{\sigma}^{th}_{vp\text{-}el} \sim 137.6\,[MPa]$	$\bar{\sigma}^{th}_{vp\text{-}el} \sim 90.3\,[MPa]$	$\bar{\sigma}^{th}_{vp\text{-}el} \sim 80.4\,[MPa]$	$\bar{\sigma}^{th}_{vp\text{-}el} \sim 67.0\,[MPa]$
$\dot{\bar{\varepsilon}} = 10^{-4}\,[s]^{-1}$	$\bar{\sigma}^{th}_{vp\text{-}el} \sim 122.1\,[MPa]$	$\bar{\sigma}^{th}_{vp\text{-}el} \sim 85.4\,[MPa]$	$\bar{\sigma}^{th}_{vp\text{-}el} \sim 70.5\,[MPa]$	$\bar{\sigma}^{th}_{vp\text{-}el} \sim 55.2\,[MPa]$
Lot Forte densité $\rho \sim 98.1 \pm 0.3\,\%$				
$\dot{\bar{\varepsilon}} = 10^{-4}\,[s]^{-1}$	$\bar{\sigma}^{th}_{vp\text{-}el} \sim 183.4\,[MPa]$	$\bar{\sigma}^{th}_{vp\text{-}el} \sim 111.6\,[MPa]$	$\bar{\sigma}^{th}_{vp\text{-}el} \sim 78.7\,[MPa]$	$\bar{\sigma}^{th}_{vp\text{-}el} \sim 51.9\,[MPa]$
$\dot{\bar{\varepsilon}} = 10^{-3}\,[s]^{-1}$	$\bar{\sigma}^{th}_{vp\text{-}el} \sim -\,[MPa]$	$\bar{\sigma}^{th}_{vp\text{-}el} \sim 116.0\,[MPa]$	$\bar{\sigma}^{th}_{vp\text{-}el} \sim 90.2\,[MPa]$	$\bar{\sigma}^{th}_{vp\text{-}el} \sim 70.4\,[MPa]$
$\dot{\bar{\varepsilon}} = 10^{-2}\,[s]^{-1}$	$\bar{\sigma}^{th}_{vp\text{-}el} \sim -\,[MPa]$	$\bar{\sigma}^{th}_{vp\text{-}el} \sim 122.1\,[MPa]$	$\bar{\sigma}^{th}_{vp\text{-}el} \sim 100.1\,[MPa]$	$\bar{\sigma}^{th}_{vp\text{-}el} \sim 93.3\,[MPa]$
$\dot{\bar{\varepsilon}} = 10^{-1}\,[s]^{-1}$	$\bar{\sigma}^{th}_{vp\text{-}el} \sim -\,[MPa]$	$\bar{\sigma}^{th}_{vp\text{-}el} \sim 130.2\,[MPa]$	$\bar{\sigma}^{th}_{vp\text{-}el} \sim 135.9\,[MPa]$ Décohésion JdG Observée	$\bar{\sigma}^{th}_{vp\text{-}el} \sim 104.5\,[MPa]$ Décohésion JdG Observée

TABLEAU B.2 – Tableau récapitulant les contraintes d'entrée en plasticité des différents essais expérimentaux menés [**Salvo 2014**].

La contrainte d'entrée en plasticité correspond à l'intersection de la droite théorique représentant le régime élastique et la droite expérimentale représentant le régime visco-plastique établi (pente d'écrouissage apparente constante reprise de Tab. B.1). Ces contraintes (cf. Tab. B.2) sont différentes de celles de [**Salvo 2014**] car ce dernier a préféré utiliser une autre méthodologie pour relever ces contraintes.

C Partie II Chapitre III - Étude sur le type d'élément utilisé au sein des simulations FEM monocristallines - Problème d'incompressibilité. Comparaisons des réponses CAST3M et ABAQUS

C.1 Introduction - Comparaison CAST3M - ABAQUS : Problème d'incompressibilité

♣ Y a t-il un problème d'incompressibilité suite à l'utilisation des éléments CU20 sur CAST3M ?

La loi utilisée lors des simulations numériques sur monocristaux est une loi de plasticité cristalline. Celle-ci est élastique plastique parfaite anisotrope. L'anisotropie ne concerne que la partie plastique et provient d'une part de la différence des contraintes résolues de cisaillements critiques des différents modes et d'autres part de la projection de la contrainte sur les systèmes de glissements. La partie élastique, quant-à elle est bien isotrope. Le problème d'incompressibilité soulevé provient seulement de la partie plastique. Cette dernière est fonction de tenseurs purement déviatorique.

La déformation est la somme d'une déformation élastique et d'une déformation plastique. Une fois dans le régime plastique (ce qui revient à dire que la contribution de la déformation élastique à la déformation considérée est négligeable), la déformation n'est plus qu'une composition de tenseurs purement déviatoriques. Ceci entraîne la condition suivante : $Tr(\boldsymbol{\varepsilon}) = 0$, là où le champ de déformation est défini, à savoir aux points d'intégrations. Le champ de déformation étant construit par les degrés de libertés aux noeuds (déplacements), cette condition d'incompressibilité se traduit par des équations à respecter par les degrés de libertés. Plus il y a de points d'intégrations dans l'élément, plus il y aura d'équations à satisfaire. Ceci amène l'idée qu'un élément présentant une intégration réduite serait moins contraint par cette condition et devrait donner de meilleur résultat numérique.

Afin de répondre à cette question, deux codes de simulations numériques ont été testés ainsi que plusieurs éléments. Tout d'abord les réponses effectives sont comparées. Dans la suite, les contraintes aux points d'intégrations sont comparées.

C.2 Rappel du problème d'intérêt

La comparaison ne se fera pas directement avec la loi de plasticité cristalline. En ce sens une loi élastique plastique parfaite isotrope sera utilisée afin de se rapprocher du problème d'intérêt. Les simulations numériques ont été effectuées sur les codes de calculs numériques ABAQUS et CAST3M.

Du côté d'**ABAQUS** les éléments **C3D20** (20 noeuds - 27 points d'intégrations) et **C3D20R** (20 noeuds - 8 points d'intégrations) ont été utilisés. Il existe également l'élément C3D20H* mais ce dernier n'a pas été utilisé dans la comparaison. Du côté de **CAST3M** les éléments **CU20** (20 noeuds - 27 points d'intégrations) et **IC20** (20 noeuds - 27 points d'intégrations - formulation « Incompressible ») ont été comparés.

D'un point de vue géométrique, l'échantillon illustré Fig. C.1, est un parallélépipède rectangle parfait de dimensions $2.8 \times 2.8 \times 8.0\,[mm]^3$. Cet échantillon a été divisé en 250 Éléments : $5 \times 5 \times 10$. Il y a une légère différence avec l'échantillon cylindrique de [**Sawbridge et Sykes 1971**].

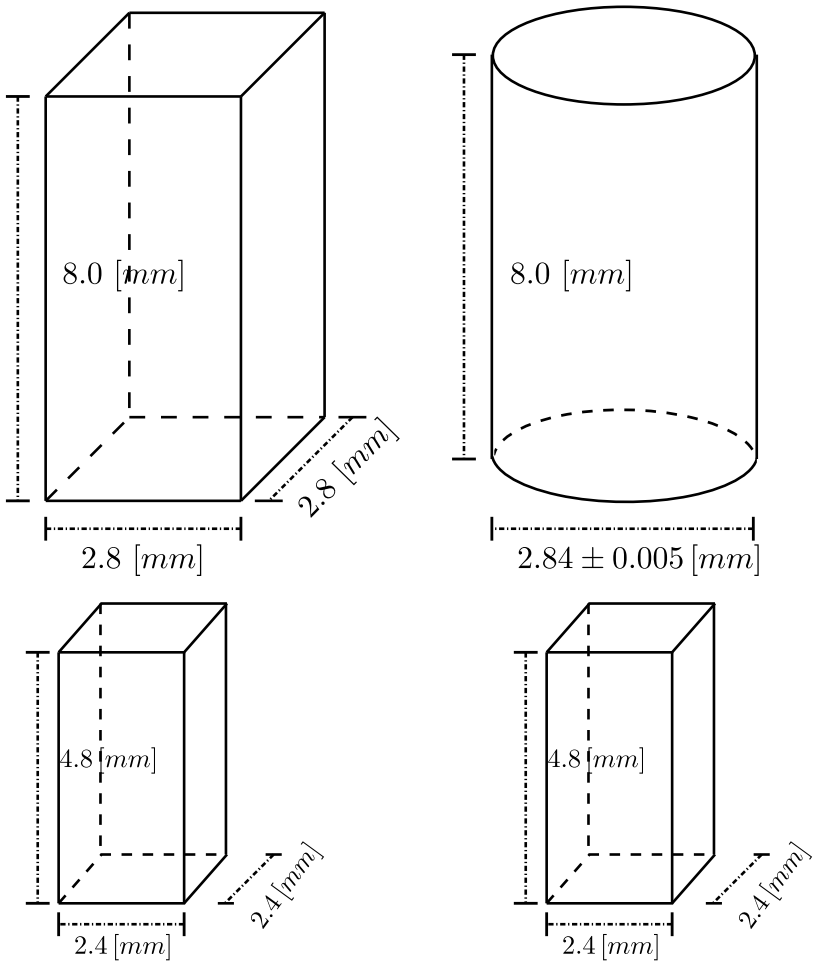


FIGURE C.1 – Géométrie de l'échantillon. À Gauche (×2) Parallélépipède étudié lors des simulations numériques. À Droite : Cylindre issu de l'expérimental de SAWBRIDGE.

Comme explicité ci-dessus, une loi élasto-plastique parfaite isotrope est utilisée ceci afin de se rapprocher de la loi de plasticité cristalline sans aller jusqu'à la complexité de cette dernière loi. Les caractéristiques mécaniques sont les suivantes : Le module d'Young $E = 100.0\,[GPa]$, le coefficient de Poisson $\nu = 0.3\,[-]$, la contrainte d'entrée en plasticité $\sigma_0 = 100.0\,[MPa]$. La contrainte d'entrée en plasticité est à approcher des contraintes résolues de cisaillements critiques de la loi de plasticité cristalline. Les valeurs mécaniques prises sont du bon ordre de grandeur comparativement aux valeurs des caractéristiques mécaniques utilisées lors des simulations sur monocristaux à savoir le cas d'étude de [**Sawbridge et Sykes 1971**]†.

∗. L'élément C3D20H est un élément 20 noeuds, 27 points d'intégrations avec une formulation Hybride.

†. Pour le cas d'étude de [**Sawbridge et Sykes 1971**] : $\tau^{CRSS}_{\{100\}} \sim 30\,[MPa]$, $\tau^{CRSS}_{\{110\}} \sim 68\,[MPa]$, $\tau^{CRSS}_{\{111\}} \sim 55\,[MPa]$.

Pour ce qui est du contexte de résolution, les simulations numériques ont été effectuées sous l'hypothèse des petites perturbations (HPP) ou sous l'hypothèse des grandes déformations (GD). Pour l'étude de la réponse effective les deux approches ont été retenues. Pour ce qui est de l'étude locale, seuls les résultats issus des simulations HPP sont explicités. Le temps de fin des simulations est $t_{fin} = 200.0\,[s]$ avec un temps de sauvegarde de $t_{sauv} = 0.5\,[s]$, ce qui fait un nombre de pas de $N_{Pas} = 400\,[-]$.

Pour ce qui est du chargement et des conditions aux limites, ces deux derniers sont illustrés Fig. III.3. Les conditions de blocages sont les suivantes :

- Surface du bas : BLOCAGE du déplacement des noeuds dans trois directions - $U_X\,U_Y\,U_Z$.
- Surface du haut : BLOCAGE du déplacement des noeuds dans deux directions - $U_X\,U_Y$.
- Création d'un noeud « Fantôme » nommé REF. Une équation relie le déplacement U_Z du noeud fantôme avec le déplacement U_Z de l'ensemble des noeuds de la surface du haut ($Surf_{Haut}$) : $REF_{U_Z} = Noeuds(Surf_{Haut})_{U_Z}$.

Les conditions de chargements sont les suivantes :

- Déplacement imposé au noeud fantôme REF_{U_Z}. Le déplacement U_Z est tel que l'échantillon atteindra une déformation macroscopique de $\bar{\varepsilon}_{33} = 2\%$ atteint pour le temps final de simulation. Ceci correspond à une vitesse de déformation de $\dot{\bar{\varepsilon}}_{33} = 10^{-4}\,[s]^{-1}$ imposée uniquement à la surface du haut de l'échantillon.

La récupération et post traitement des données s'effectuent comme suit. Sur ABAQUS la force de réaction RF_Z est récupérée au noeud fantôme REF. Ce dernier contient l'ensemble des forces de réactions de la surface supérieure. Sur CAST3M, la force de réaction RF_Z a été relevée sur l'ensemble des noeuds de la surface supérieure. Ces dernières ont ensuite été sommées. Enfin pour obtenir la contrainte effective $\bar{\sigma}_{33}$, cette force de réaction totale a été divisée par la surface initiale S_0 (HPP-GD) : $\bar{\sigma}_{33} = \dfrac{RF_{Tot-Z}}{S_0}$. La déformation effective a été calculée en utilisant le déplacement du noeud fantôme divisé par la hauteur de l'éprouvette : $\bar{\varepsilon}_{33} = \dfrac{u_Z}{h}$.

La manière de relever la contrainte effective ($\bar{\sigma}_{33}$) que cela soit sur ABAQUS ou CAST3M n'influence pas le résultat. Ces deux méthodes sont équivalentes. Le fait de changer de méthode s'explique simplement par le fait que je n'ai pas réussi sur CAST3M à utiliser cette méthode (le chargement se passe bien, la récupération au noeud fantôme REF non). Dans tous les cas, les deux méthodes sont équivalentes.

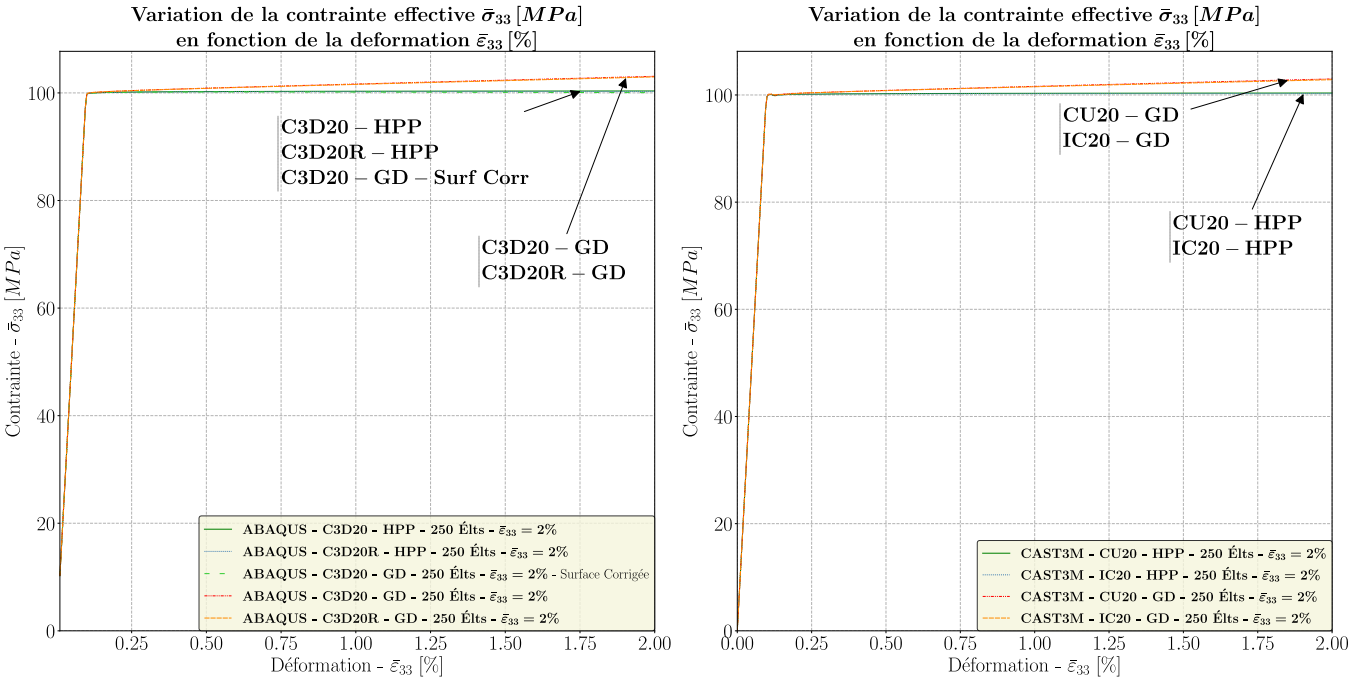
C.3 Étude de la réponse effective

Lors des simulations, l'échantillon prend une forme de tonneau caractéristique de l'essai de compression avec blocage des surfaces inférieure et supérieure. Sous l'hypothèse des petites perturbations (HPP), le fait de garder la surface finale égale à la surface initiale pour le calcul de la contrainte effective se justifie de par l'hypothèse des petits déplacements découlant de l'hypothèse HPP. Par contre sous l'hypothèse des Grandes Déformations, si la surface finale est prise égale à la surface initiale, une pente d'écrouissage apparaît traduisant la mise en tonneau de l'échantillon i.e. l'augmentation de la surface au plan médian de l'échantillon (la surface aux mors est bloquée).

Dans tout les cas, la courbe sous l'hypothèse des grandes déformations de Fig. C.2-(a) présente une correction de la surface pour le calcul de la contrainte effective ($\bar{\sigma}_{33}$) explicitée ci-dessous : $S_{Final} = \frac{4.5}{5.5} \times S_{Mi-Sect} + \frac{1}{5.5} \times S_0$, avec $S_{Mi-Sect}$ la surface à mi-section (dans la direction z, c'est la surface la plus grande de l'échantillon) et S_0 la surface initiale.

Il n'est pas certain que les expérimentateurs aient effectués une quelconque correction de leurs courbes. En effet ces derniers ne disent pas s'ils utilisent ou non une surface « actualisée » pour la

correction des courbes contraintes déformations. Afin de se rapprocher des conditions expérimentales, la surface permettant le calcul de la contrainte effective devrait être prise égale à la surface initiale et ce malgré que la simulation s'effectue sous l'hypothèse des grandes déformations.



(a) Simulation ABAQUS.

(b) Simulation CAST3M.

FIGURE C.2 – Contrainte effective ($\bar{\sigma}_{33}$) en fonction de la déformation effective ($\bar{\varepsilon}_{33}$) sous l'hypothèse des petites perturbations (HPP) ou sous l'hypothèse des grandes déformations (GD).

Les réponses effectives sont sensiblement les mêmes. Pour avoir une idée des différences de contraintes obtenues avec les différents éléments et codes de simulations numériques, la contrainte effective $\bar{\sigma}_{33}$ correspondant à $\bar{\varepsilon}_{33} = 2\%$ est explicitée ci-dessous. Cette contrainte effective se rapporte seulement aux noeuds de la surface du haut.

- ***CAST3M***
  - $\bar{\sigma}_{33-\mathbf{CU20}-HPP-250\,Elts-\bar{\varepsilon}_{33}=2\%} = 100.36479\,[MPa]$
  - $\bar{\sigma}_{33-\mathbf{IC20}-HPP-250\,Elts-\bar{\varepsilon}_{33}=2\%} = 100.26020\,[MPa]$
  - $\bar{\sigma}_{33-\mathbf{CU20}-GD-250\,Elts-\bar{\varepsilon}_{33}=2\%} = 102.99489\,[MPa]$
  - $\bar{\sigma}_{33-\mathbf{IC20}-GD-250\,Elts-\bar{\varepsilon}_{33}=2\%} = 102.85204\,[MPa]$
- ***ABAQUS***
  - $\bar{\sigma}_{33-\mathbf{C3D20}-HPP-250\,Elts-\bar{\varepsilon}_{33}=2\%} = 100.36431\,[MPa]$
  - $\bar{\sigma}_{33-\mathbf{C3D20R}-HPP-250\,Elts-\bar{\varepsilon}_{33}=2\%} = 100.25986\,[MPa]$
  - $\bar{\sigma}_{33-\mathbf{C3D20}-GD-250\,Elts-\bar{\varepsilon}_{33}=2\%} = 103.08717\,[MPa]$
  - $\bar{\sigma}_{33-\mathbf{C3D20R}-GD-250\,Elts-\bar{\varepsilon}_{33}=2\%} = 102.97283\,[MPa]$

Afin d'avoir un aperçu de l'écart, celui-ci sera calculé de la manière suivante : $Ecart_{X-Y} = 100.0 \times \dfrac{|X-Y|}{Y}$, avec X et Y en $[MPa]$. Y sera la valeur la plus basse rencontrée sous l'hypothèse considérée. Par exemple l'élément C3D20R pour les simulations faites sous l'hypothèse des petites perturbations et l'élément IC20 pour les simulations faites sous l'hypothèse des grandes déformations.

- ***Hypothèse des petites perturbations***
  - ***CAST3M vs ABAQUS***

- ♢ $Ecart_{\mathbf{CU20(HPP)}-C3D20R(HPP)} = 0.10492\,[\%]$
- ♢ $Ecart_{\mathbf{IC20(HPP)}-C3D20R(HPP)} = 0.00033\,[\%]$

▶ ***ABAQUS vs CASTEM***

- ♢ $Ecart_{\mathbf{C3D20(HPP)}-C3D20R(HPP)} = 0.10444\,[\%]$

▷ ***Hypothèse des grandes déformations***

▶ ***CAST3M***

- ♢ $Ecart_{\mathbf{CU20(GD)}-IC20(GD)} = 0.14285\,[\%]$

▶ ***ABAQUS***

- ♢ $Ecart_{\mathbf{C3D20(GD)}-IC20(GD)} = 0.23513\,[\%]$
- ♢ $Ecart_{\mathbf{C3D20R(GD)}-IC20(GD)} = 0.12079\,[\%]$

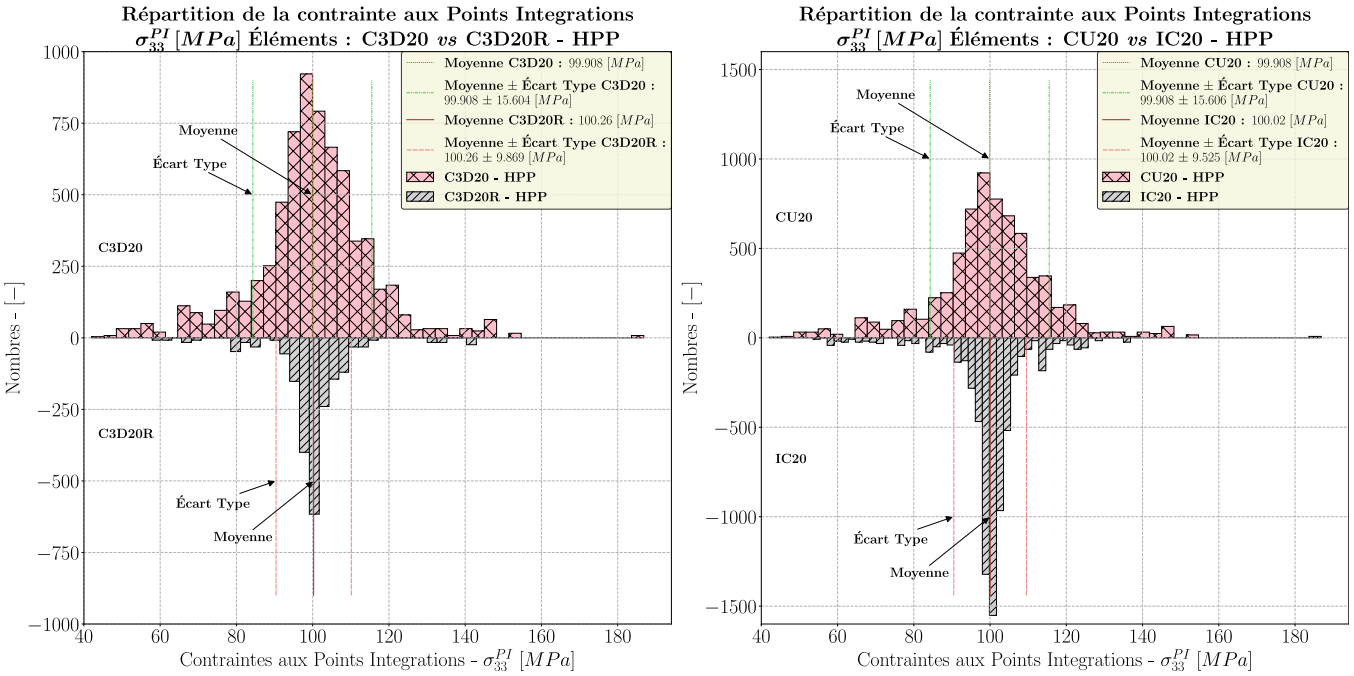
La prise en compte de la mise en tonneau de l'échantillon (actualisation de la surface S_0 par une pondération de la surface à mi-section avec la surface du haut) permet d'obtenir une pente d'écrouissage quasiment nulle pour les simulations sous l'hypothèse des grandes déformations.

Cette dernière correction ne sera pas prise en compte dans les simulations numériques avec la loi de plasticité cristalline et ce même si la simulation s'effectue sous l'hypothèse des grandes déformations. Comme énoncé plus haut, le positionnement des expérimentateurs sur l'actualisation de la surface n'est pas clair. L'hypothèse sera faites que ces derniers ne corrigent pas la surface et se base sur la surface initiale afin de calculer la contrainte effective.

En résumé les réponses effectives, sous la même hypothèse de simulation (HPP ou GD), donnent les mêmes résultats numériques sur CAST3M et ABAQUS. Il y a une légère différence entre les éléments 27 points d'intégrations et les éléments sous intégrés. Cet écart, qui augmente avec le taux de déformation effectif, semble négligeable pour la déformation effective envisagée dans les simulations numériques. Il pourra être utilisé au choix, l'élément IC20 ou l'élément CU20 sous CAST3M afin de reprendre et finir les simulations monocristalline avec le code de calcul numérique CAST3M. L'élément IC20 semblerait être logique mais à ce stade et comme l'écart est faible entre les éléments CU20 et IC20 sur la réponse effective, il a été décidé de retenir l'élément de type CU20. Néanmoins et afin de vérifier que ce choix est judicieux, les réponses locales obtenues en fonction des types d'éléments utilisés ont été comparées.

C.4 Étude de la réponse « locale »

Dans la sous partie suivante, seules les simulations faites sous l'hypothèse HPP sont retenues. Les contraintes aux points d'intégrations (σ_{33}^{PI}) sont étudiées. Des images du code de calcul numérique ABAQUS (Fig. C.4) sont présentées pour avoir un aperçu de la répartition spatiale de la contrainte σ_{33}*. Les histogrammes (Fig. C.3) regroupent la contrainte obtenue directement par le code de simulation numérique. La contrainte est celle obtenue aux points d'intégrations de chacun des éléments. Il est à noter que l'élément réduit C3D20R (Fig. C.3-(a)) aura naturellement moins de fréquences d'apparitions des contraintes comparativement à l'élément C3D20 de par la différence du nombre de points d'intégrations dans l'élément.



(a) ABAQUS - C3D20 vs C3D20R.

(b) CAST3M - CU20 vs IC20.

FIGURE C.3 – Contrainte (σ_{33}^{PI}) relevée aux points d'intégrations†.

Il est rassurant de remarquer sur les histogrammes que le champ de contrainte local obtenu via le code de calcul numérique ABAQUS Fig. C.3-(a) et celui obtenu via le code de calcul numérique CAST3M Fig. C.3-(b), concorde même au niveau local. La différence, entre les éléments à 27 points d'intégration et les éléments sous intégrés (8 points d'intégrations) ou les éléments incompressible IC20, se retrouve non pas sur la moyenne mais sur l'écart type. Celui-ci diffère d'un facteur 1.58‡ (ABAQUS) et d'un facteur 1.64§ (CAST3M) comme en atteste les histogrammes : Fig. C.3-(a) ainsi que Fig. C.3-(b). Les contraintes sont donc plus homogène pour un élément sous intégré ou pour un élément incompressible comparativement à un élément présentant 27 points d'intégrations.

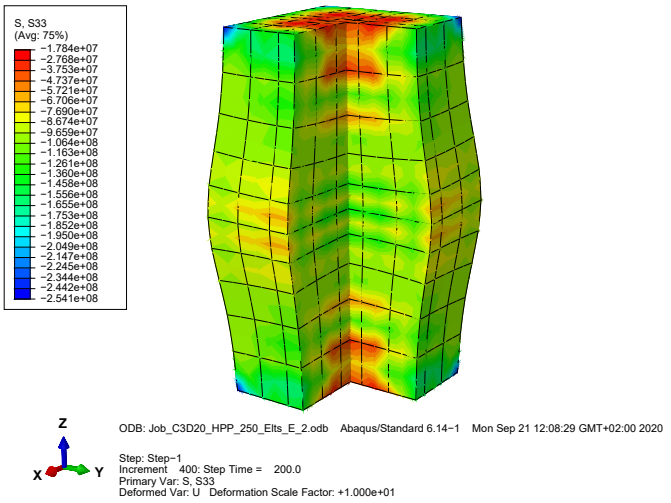
Il est attendu une augmentation des différences d'écarts types avec une augmentation de la déformation effective. Il est possible que pour un certain niveau de déformation effective, les réponses effectives diffèrent entre un élément intégré complètement et un élément sous intégré ou incompressible.

∗. Sous ABAQUS, les iso-valeurs sont obtenues via une interpolation aux noeuds, interpolation faite avec les fonctions de formes éléments finis. Pour ce qui est de CAST3M, les images ne sont pas explicitées.

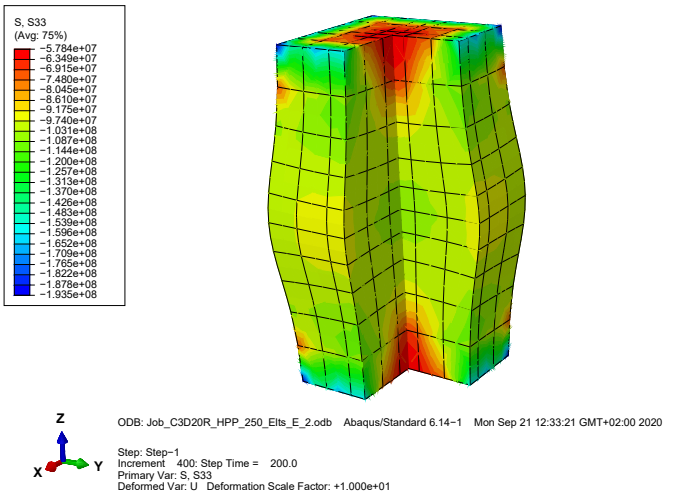
†. Les fréquences sont en réalité toutes positives. Afin de rendre le graphique clair et de pouvoir comparer sur un même graphique les deux éléments étudiés, les fréquences de l'un des deux éléments ont été prises négatives.

‡. Rapport entre les différents écart-types : $\frac{ET_{C3D20}}{ET_{C3D20R}} \sim 1.58$.

§. Rapport entre les différents écart-types : $\frac{ET_{CU20}}{ET_{IC20}} \sim 1.64$.



(a) Simulation ABAQUS - Élément C3D20.



(b) Simulation ABAQUS - Élément C3D20R.

FIGURE C.4 – Répartition spatiale de la contrainte (σ_{33}) dans l'échantillon.

Pour ce qui est d'ABAQUS la répartition graphique semblerait concorder avec les histogrammes obtenues. La contrainte est plus homogène sur Fig. C.4-(b) que sur Fig. C.4-(a). Le centre pour cette deuxième figure semble complètement homogène contrairement à la première.

Pour ce qui est de CAST3M, les images ne sont pas explicitées.

C.5 Conclusions

Il est à remarquer que l'écart obtenu entre les éléments C3D20 et C3D20R sur le code de calcul ABAQUS sont dépendant du raffinement du maillage et du rapport $\frac{Hauteur}{Cote}$. Plus le rapport diminue et moins le maillage est fin, plus le problème semble prendre de l'ampleur (écart augmente, écart dans la réponse effective). Pour la vérification avec les essais expérimentaux de [**Byron 1968a**] et [**Mordike 1976**] il serait peu être plus prudent d'utiliser les éléments IC20 de CAST3M pour la simple raison que le rapport $\frac{Hauteur}{Cote}$ n'est pas le même que [**Sawbridge et Sykes 1971**]. Ce rapport est beaucoup plus faible pour ces deux expérimentateurs.

Néanmoins et compte tenu des résultats obtenus (écarts faibles aux niveaux effectif ou local), il semblerait que le problème d'incompressibilité ne nous concerne pas ou peu pour les simulations s'effectuant avec une loi élasto-plastique parfaite isotrope et pour une déformation effective de $\bar{\varepsilon}_{33} = 2\%$. En conclusion, l'élément de type CU20 a été retenu pour les simulations numériques présentées au chapitre 4 (cf. chapitre IV).

D Partie II Chapitre III - Formalismes des lois monocristallines utilisées Cadre des Matériaux Standards Généralisés

Ce chapitre a pour but de montrer que le potentiel de force issu des différents formalismes (formalisme en Cosinus Hyperblique CosH et formalisme en Double Décrochement DD) respecte les conditions des matériaux standards généralisés. Pour ce faire, le potentiel en question doit respecter 3 conditions définies ci-dessous Eq. D.1.

Le potentiel de force ψ doit vérifier 3 conditions :

$(\mathcal{H}_0)$ ψ est convexe

$(\mathcal{H}_1)$ ψ est positive sur son ensemble de définition

$(\mathcal{H}_2)$ $\psi(0) = 0$

$$
\begin{aligned}
&\text{Avec :} && \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathsf{th}}_{\mathsf{vp}}(\boldsymbol{x},t) = \frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{\sigma}}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{x},t)) \\
&&& \psi = \sum_s \psi_s \\
&\text{D'un côté :} && \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathsf{th}}_{\mathsf{vp}} = \sum_s \dot{\gamma}_s \boldsymbol{m_s} \quad \text{d'après Eq. III.1} \\
&\text{D'un autre :} && \frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{\sigma}} = \sum_s \frac{\partial \psi_s}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \\
&&& \quad = \sum_s \frac{\partial \psi_s}{\partial \tau_s} \underbrace{\frac{\partial \tau_s}{\partial \boldsymbol{\sigma}}}_{*} \\
&&& \quad = \sum_s \frac{\partial \psi_s}{\partial \tau_s} \boldsymbol{m_s} \\
&\text{Par identification :} && \dot{\gamma}_s(\tau_s) = \frac{\partial \psi_s}{\partial \tau_s}(\tau_s)
\end{aligned}
\tag{D.1}
$$

Travaillons sur ψ_s défini tel que $\psi_s(\tau_s) = \int_0^{\tau_s} \dot{\gamma}_s(u)\mathrm{d}u$

∗. En reprenant la définition de τ_s définie Eq. III.2 : $\tau_s = \boldsymbol{M} : \boldsymbol{m_s}$, le tenseur de Mandel $\boldsymbol{M}$ devient le tenseur des contraintes $\boldsymbol{\sigma}$ sous l'hypothèse des petites perturbations. Par suite la contrainte résolue du système s s'exprime $\tau_s = \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{m_s}$. Enfin l'égalité suivante est déduite $\dfrac{\partial \tau_s}{\partial \boldsymbol{\sigma}} = \boldsymbol{m_s}$.

D.1 Formalisme Cosinus Hyperbolique

La loi de plasticité cristalline avec le formalisme en Cosinus Hyperbolique est défini dans l'équation Eq. III.2. Le potentiel de force issu de cette loi peut se calculer explicitement et est défini par Eq. D.2.

$$\begin{aligned} \psi_s^{CosH}(\tau_s) &= \int_0^{\tau_s} \dot{\gamma}_s(u)\mathrm{du} \\ \text{Avec :} \quad & \dot{\gamma}_s \quad \text{défini dans Eq. III.2} \\ & \text{Le potentiel de force se calcule explicitement et devient :} \\ \text{En posant :} \quad & a = \rho_i^{\mathsf{m}} \nu_D b^2 \times exp\left(-\frac{\Delta H_i^0}{k_{\mathsf{b}} T}\right) \\ \psi_s^{CosH}(\tau_s) &= a \times \left[\tau_i^0 \times SinH\left(\frac{|\tau_s|}{\tau_i^0}\right) - |\tau_s|\right] \end{aligned} \tag{D.2}$$

Afin de vérifier que le potentiel de force respecte bien les conditions des matériaux standards généralisés, vérifions les 3 hypothèses en commençant par $(\mathcal{H}_2)$ puis $(\mathcal{H}_1)$ et enfin, finissons par $(\mathcal{H}_0)$ (Eq. D.1).

$$\begin{aligned} & (\mathcal{H}_2)\ \psi \text{ vérifie : } \psi(0) = 0. \\ \text{Ici :} \quad & \psi_s^{CosH}(\tau_s) \underset{\tau_s \to 0^+}{\longrightarrow} 0 \\ & \psi_s^{CosH}(\tau_s) \underset{\tau_s \to 0^-}{\longrightarrow} 0 \\ \text{D'où :} \quad & \psi_s^{CosH}(0) = 0 \end{aligned} \tag{D.3}$$

$$\begin{aligned} & (\mathcal{H}_1)\ \psi \text{ est positive sur son ensemble de définition.} \\ \text{On a :} \quad & \dot{\gamma}_s(\tau_s) > 0 \quad | \text{ Si } \tau_s > 0 \\ & \dot{\gamma}_s(\tau_s) < 0 \quad | \text{ Si } \tau_s < 0 \\ \text{D'où :} \quad & \psi_s^{CosH} \text{ est croissante} \quad | \text{ Si } \tau_s > 0 \\ & \psi_s^{CosH} \text{ est décroissante} \quad | \text{ Si } \tau_s < 0 \\ \text{Or :} \quad & \psi_s^{CosH}(0) = 0 \quad \text{Eq. D.3} \\ \text{On en déduit :} \quad & \psi_s^{CosH} \text{ est positive sur son ensemble de définition.} \end{aligned} \tag{D.4}$$

$$\begin{aligned} & (\mathcal{H}_0)\ \psi \text{ est convexe.} \\ & \text{Utilisons : } \psi \text{ est convexe.} \Leftrightarrow \frac{\partial^2 \psi}{\partial \tau_s^2} \geqslant 0 \quad (\mathbf{1}) \\ \text{De par sa définition :} \quad & \frac{\partial^2 \psi_s}{\partial \tau_s^2} = \frac{\partial \dot{\gamma}_s}{\partial \tau_s} \\ \text{En posant :} \quad & a = \rho_i^{\mathsf{m}} \nu_D b^2 \times exp\left(-\frac{\Delta H_i^0}{k_{\mathsf{b}} T}\right) \\ \text{Par le calcul :} \quad & \frac{\partial \dot{\gamma}_s}{\partial \tau_s} = \frac{a}{\tau_i^0} \times SinH\left(\frac{|\tau_s|}{\tau_i^0}\right) \\ \text{Or :} \quad & SinH(x) \geqslant 0 \quad | \text{ Si } x \geqslant 0 \\ \text{D'après } (\mathbf{1}), \text{ on en déduit :} \quad & \psi_s^{CosH} \text{ est convexe.} \end{aligned} \tag{D.5}$$

Pour tout système de glissement, le potentiel de force associé associé ψ_s^{CosH} respecte bien les trois conditions définies Eq. D.1. Le potentiel ψ^{CosH} n'est ni plus ni moins qu'une somme sur l'ensemble

des systèmes de glissement : $\psi^{CosH} = \sum_s \psi_s^{CosH}$. En ajoutant que la somme de fonctions convexes reste convexe, que la somme de fonctions positives reste positive et que la somme de fonction nulles en zéro reste une fonction nulle en zéro, on en déduit l'assertion suivante. Le potentiel de force issu du formalisme en Cosinus Hyperbolique de la loi de plasticité cristalline respecte bien les 3 conditions énoncées Eq. D.1. Ce potentiel de force s'inscrit bien dans le cadre des matériaux standards généralisés.

D.2 Formalisme Double Décrochement

La loi de plasticité cristalline avec le formalisme en Double Décrochement est définie dans l'équation Eq. III.3. Le potentiel de force de cette loi ne peut pas se calculer analytiquement de part la forme complexe de l'équation d'évolution. Il est néanmoins possible de vérifier les 3 conditions sans avoir accès à la forme explicite du potentiel de force.

Procédons de la même manière en vérifiant dans le même ordre les 3 conditions (Eq. D.1) à respecter, à savoir $(\mathcal{H}_2)$ puis $(\mathcal{H}_1)$ et enfin $(\mathcal{H}_0)$.

$$
\begin{aligned}
&(\mathcal{H}_2)\ \psi \text{ vérifie : } \psi(0) = 0. \\
&\text{On a : } \quad \psi_s^{DD}(\tau_s) = \int_0^{\tau_s} \dot{\gamma}_s(u)\mathrm{d}u \\
&\text{Avec : } \left| \ \dot{\gamma}_s \quad \text{défini dans Eq. III.3} \right. \\
&\text{On a : } \quad \int_0^{\tau_s} \dot{\gamma}_s(u)\mathrm{d}u \underset{\tau_s \to 0}{\longrightarrow} 0 \\
&\text{D'où : } \quad \psi_s^{DD}(0) = 0
\end{aligned}
\tag{D.6}
$$

$$
\begin{aligned}
&(\mathcal{H}_1)\ \psi \text{ est positive sur son ensemble de définition.} \\
&\text{On a : } \left| \begin{array}{ll} \dot{\gamma}_s(\tau_s) > 0 & \text{Si } \tau_s > 0 \\ \dot{\gamma}_s(\tau_s) < 0 & \text{Si } \tau_s < 0 \end{array} \right. \\
&\text{D'où : } \left| \begin{array}{ll} \psi_s^{DD} \text{ est croissante} & \text{Si } \tau_s > 0 \\ \psi_s^{DD} \text{ est décroissante} & \text{Si } \tau_s < 0 \end{array} \right. \\
&\text{Or : } \left| \ \psi_s^{DD}(0) = 0 \quad \text{Eq. D.6} \right. \\
&\text{On en déduit : } \quad \psi_s^{DD} \text{ est positive sur son ensemble de définition.}
\end{aligned}
\tag{D.7}
$$

$(\mathcal{H}_0)$ ψ est convexe.

Utilisons : ψ est convexe. $\Leftrightarrow \dfrac{\partial^2 \psi}{\partial \tau_s^2} \geqslant 0 \quad (\mathbf{1})$

Par sa définition : $\dfrac{\partial^2 \psi_s}{\partial \tau_s^2} = \dfrac{\partial \dot{\gamma}_s}{\partial \tau_s}$

Posons : $a = \rho_i^{\mathsf{m}} \nu_D b^2$

Rappel : $\Delta H(\tau_s) = \Delta H_i^0 \times \left[1 - \left(\dfrac{|\tau_s|}{\tau_i^P}\right)^p\right]^q$

Si $\tau_s > 0$:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \dot{\gamma}_s}{\partial \tau_s} &= \frac{\partial}{\partial \tau_s}\left[a \times exp\left(-\frac{\Delta H(\tau_s)}{k_{\mathsf{b}} T}\right)\right] \\
&= a \underbrace{\frac{\partial}{\partial \tau_s}\left[-\frac{\Delta H(\tau_s)}{k_{\mathsf{b}} T}\right]}_{(2)} \times exp\left(-\frac{\Delta H(\tau_s)}{k_{\mathsf{b}} T}\right) \\
(\mathbf{2}) &= -\frac{\Delta H_i^0}{k_{\mathsf{b}} T} \times q \times \frac{\partial}{\partial \tau_s}\left[1.0 - \left(\frac{\tau_s}{\tau_i^P}\right)^p\right] \times \left[1.0 - \left(\frac{\tau_s}{\tau_i^P}\right)^p\right]^{q-1} \\
(\mathbf{2}) &= \frac{\Delta H_i^0}{k_{\mathsf{b}} T} \times p\, q \times \left(\frac{\tau_s^{p-1}}{\left(\tau_i^P\right)^p}\right) \times \left[1.0 - \left(\frac{\tau_s}{\tau_i^P}\right)^p\right]^{q-1}
\end{aligned} \tag{D.8}$$

$$\frac{\partial \dot{\gamma}_s}{\partial \tau_s} = a\, p\, q \times \frac{\Delta H_i^0}{k_{\mathsf{b}} T} \times \left(\frac{|\tau_s|^{p-1}}{\left(\tau_i^P\right)^p}\right) \times \left[1.0 - \left(\frac{|\tau_s|}{\tau_i^P}\right)^p\right]^{q-1} \times exp\left(-\frac{\Delta H(\tau_s)}{k_{\mathsf{b}} T}\right)$$

De plus : $\tau_s \leqslant \tau_i^P \Rightarrow 1.0 - \left(\dfrac{\tau_s}{\tau_i^P}\right)^p \geqslant 0$

Dans tous les cas : $\dfrac{\partial \dot{\gamma}_s}{\partial \tau_s} \geqslant 0$

D'après **(1)** : ψ_s^{DD} est convexe.

Malgré le fait que le potentiel de force ne se calcule pas analytiquement, il est quand même possible de travailler avec le formalisme en Double Décrochement. Pour tout système de glissement, le potentiel de force associé ψ_s^{DD} respecte bien les trois conditions définies Eq. D.1. Le potentiel de force ψ^{DD} n'est ni plus ni moins qu'une somme sur l'ensemble des systèmes de glissement : $\psi^{DD} = \sum_s \psi_s^{DD}$. En ajoutant que la somme de fonctions convexes reste convexe, que la somme de fonctions positives reste positive et que la somme de fonctions nulles en zéro reste une fonction nulle en zéro, on en déduit l'assertion suivante.Le potentiel de force issu du formalisme en Double Décrochement respecte bien les 3 conditions énoncées Eq. D.1. Ce potentiel de force s'inscrit bien dans le cadre des matériaux standards généralisés.

D.3 Conclusions

Les deux potentiels de forces s'inscrivent dans le cadre des matériaux standards généralisés. Le premier formalisme caractérisant la loi d'évolution est plus simple car celui-ci permet un calcul analytique du potentiel de force associé. Le deuxième formalisme ne le permet pas. Il est toujours possible d'approximer le potentiel de force de la Double Décrochement (ψ^{DD}). En effet le potentiel de force à une contrainte donnée ($\psi^{DD}(\tau_s)$) n'est rien d'autre que la somme des aire sous les courbes de $\dot{\gamma}_s$ (en balayant l'ensemble des systèmes). Ces aires peuvent être approximées numériquement.

E Partie II Chapitre IV
Étude de la convergence au maillage

L'étude de la convergence au maillage conduite sous AMITEX FFT [**Gelebart et Derouillat 2017**] s'est faite en deux phases. La première phase consiste à regarder pour quel nombre de voxels par grain la réponse se stabilise (réponse macroscopique et éventuellement les diagrammes de fréquences). La deuxième phase consiste à étudier simultanément l'impact du tirage aléatoire ainsi que le nombre de grains par VER. Une fois cet étude terminée, les caractéristiques, à savoir nombre de voxels par grain et le nombre de grains constituant le VER, seront reprises dans les simulations sur polycristaux.

Les caractéristiques des simulations numériques faites pour conduire cette convergence au maillage sont rappelées succinctement :

- ♢ Utilisation d'AMITEX FFT [**Gelebart et Derouillat 2017**] sous l'hypothèse des petites perturbations (HPP).
- ♢ Essai de Compression uniaxée à vitesse de déformation imposée : $\bar{\varepsilon}_{33} = 1\,[\%]$ et $t_{simu} = 100\,[s]^{-1}$ soit une vitesse de $\dot{\bar{\varepsilon}}_{33} = 10^{-4}\,[s]^{-1}$.
- ♢ Température de l'essai est de $T = 1350\,[°C]$.
- ♢ Conditions de périodicité aux bords. Conditions sur les $\bar{\sigma}$ aux bords également : $\bar{\sigma}_{ij} = 0$ si $(i,j) \neq (3,3)$. Ceci permet une déformation libre des surfaces. Cet état de chargement correspond à l'état de chargement au centre des essais expérimentaux de [**Salvo 2014**].

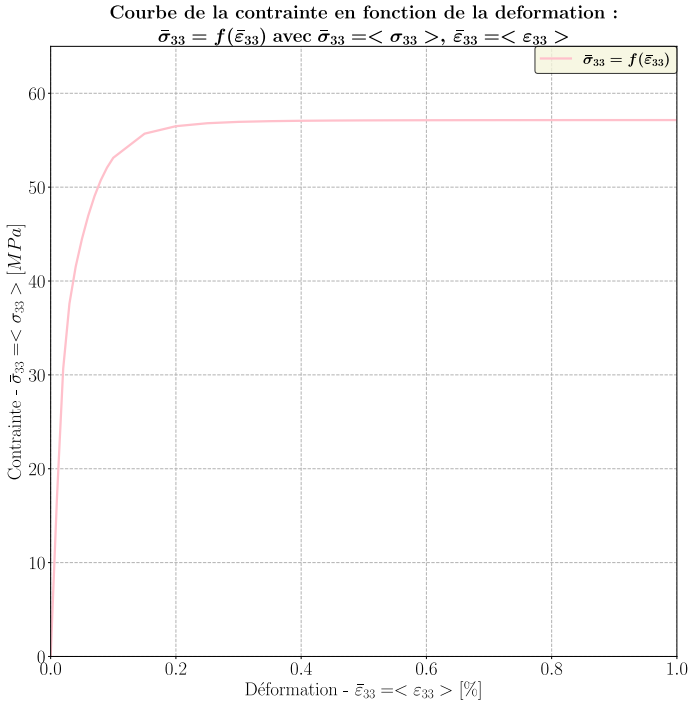


FIGURE E.1 – Courbe Contraintes - Déformations : $\bar{\sigma}_{33} = f(\bar{\varepsilon}_{33})$

L'ensemble des post-traitements suivant se font pour une déformation macroscopique de $\bar{\varepsilon}_{33} =$

1 [%]. D'après la figure Fig. E.1, le régime est purement visco-plastique pour cette déformation.

E.1 Phase I : Étude sur le nombre de Voxels par Grain.

Dans cette première phase, le travail porte sur le nombre de voxels par grain. Un VER constitué de 100 grains est utilisé. Le nombre de voxels par grain est variable :

$\boldsymbol{N_{Vox/G} \in \{100, 1000, 2000, 5000, 10000, 20000\}}$ avec $\boldsymbol{N_{Vox/G}}$ le nombre de voxels par grain considéré.

E.1.1 Contrainte moyenne et moment d'ordre 2

Dans un premier temps, la variation de la norme de la contrainte moyenne ainsi que la variation d'un certain moment d'ordre 2 sont affichées Fig. E.2.

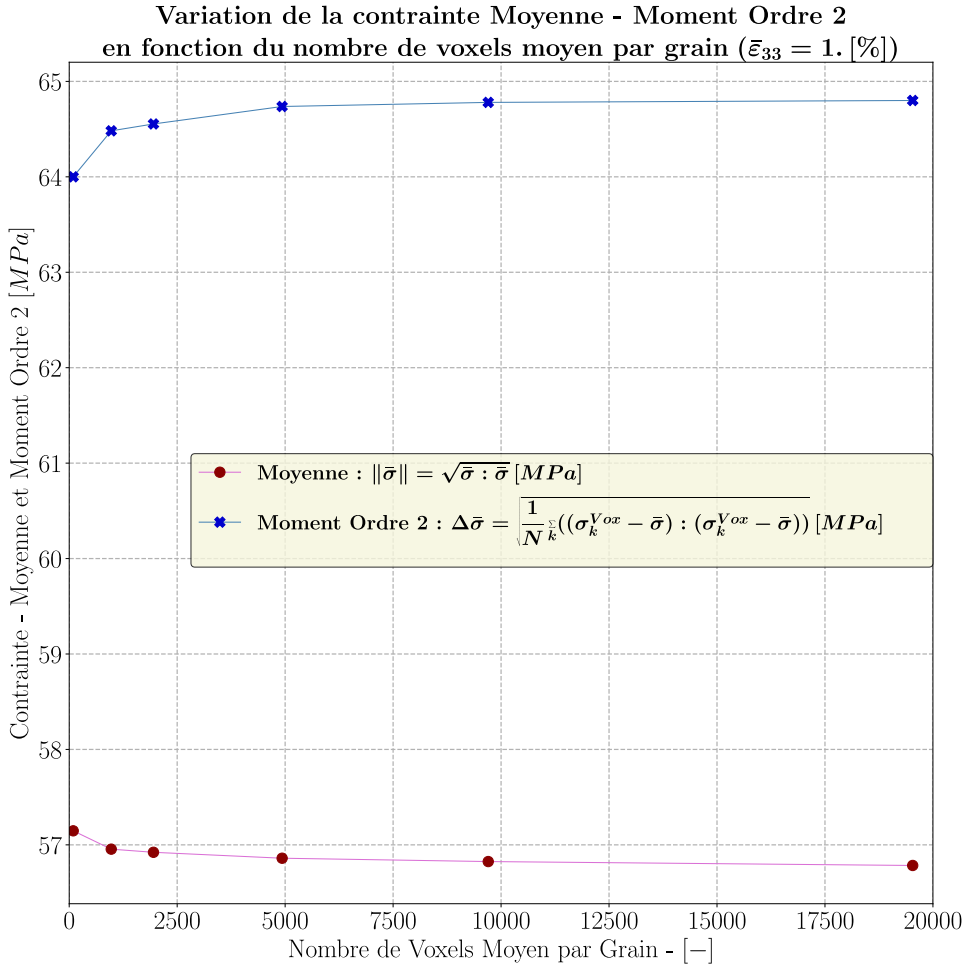


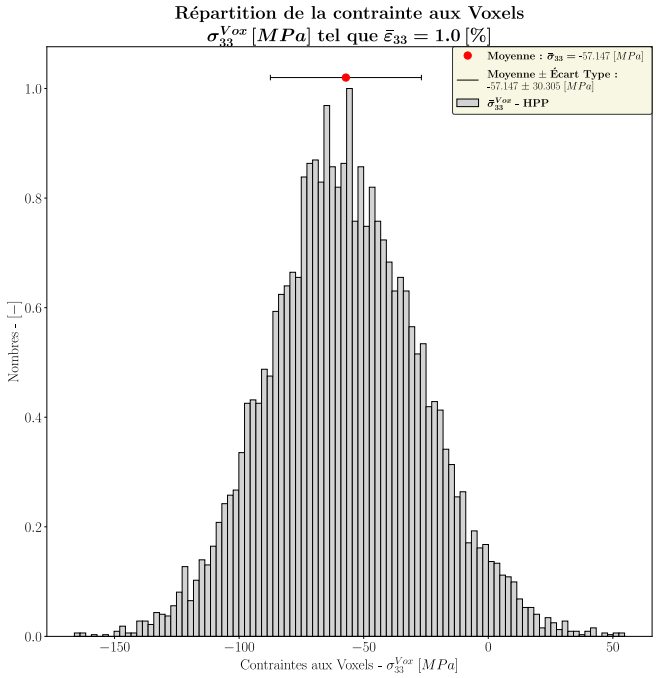
FIGURE E.2 – En rouge : Norme de la moyenne macroscopique des contraintes $\|\bar{\boldsymbol{\sigma}}\| = \sqrt{\bar{\boldsymbol{\sigma}} : \bar{\boldsymbol{\sigma}}}$, avec $\bar{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{1}{N}\sum_k^N \boldsymbol{\sigma_k}$, et N le nombre de voxels total.

En bleu : Moment d'ordre 2 $\Delta\bar{\sigma} = \sqrt{\frac{1}{N}\sum_k^N((\sigma_k - \bar{\sigma}) : (\sigma_k - \bar{\sigma}))}$.

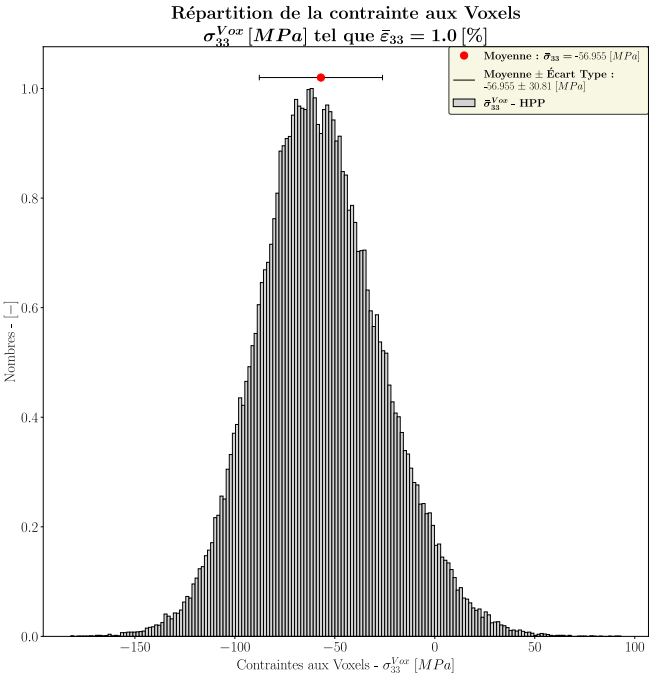
Évolution de ces deux quantités en fonction du nombre de voxels par grains.

E.1.2 Histogrammes de fréquence des contraintes

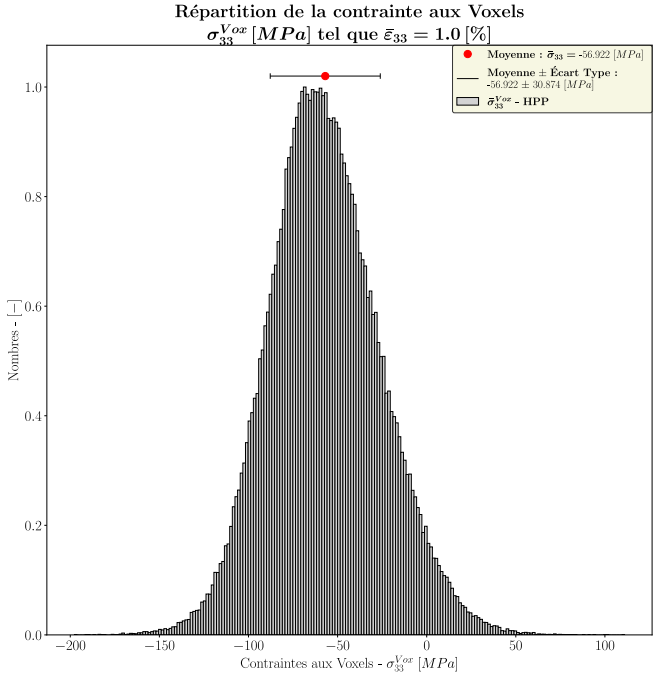
Dans un deuxième temps, la réponse locale est étudier à l'aide d'histogrammes représentant les fréquences de la contrainte dans la direction de sollicitation (σ_{33}), contrainte évaluée pour chacun des voxels. Il est à noter que la fréquence affichée est divisée par le maximum de la fréquence d'apparition obtenue. Ceci permet de comparer les différents histogrammes.



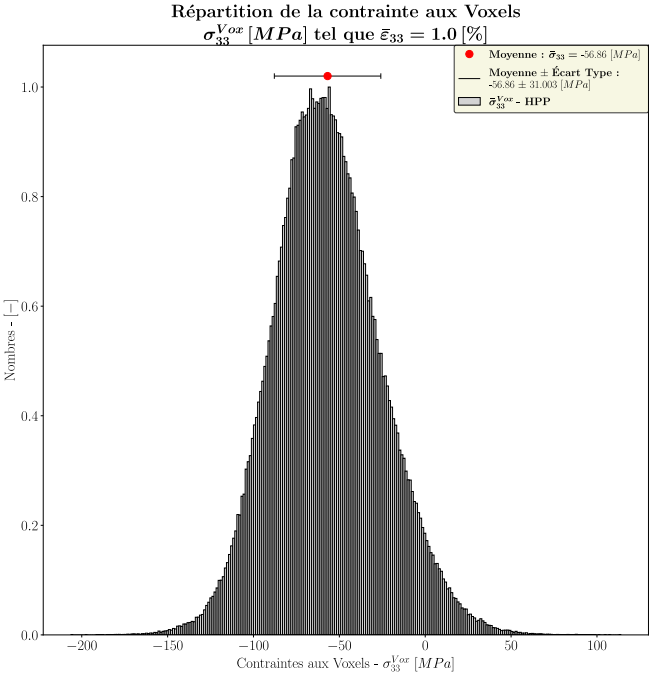
(a) 100 Voxels par Grain



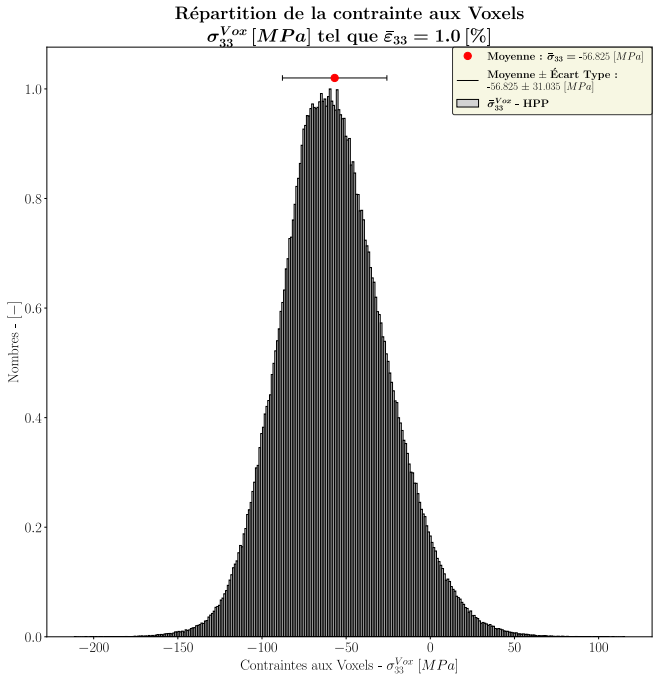
(b) 1000 Voxels par Grain



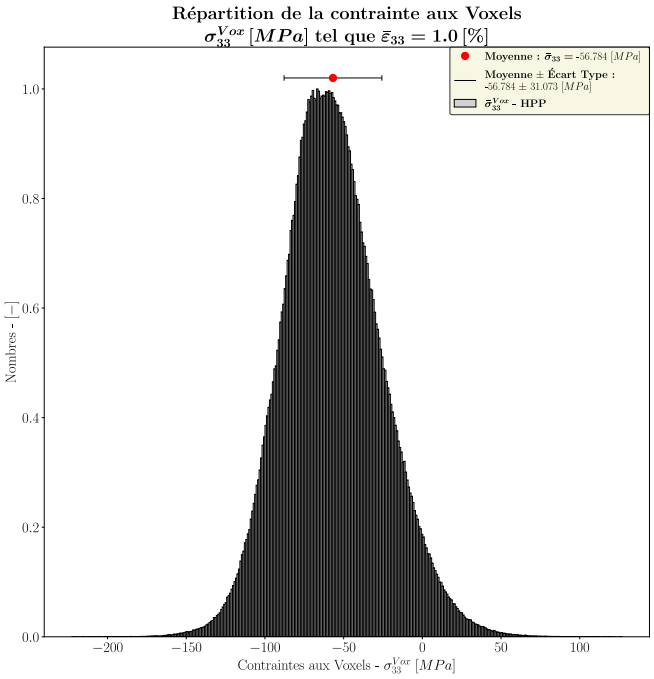
(a) 2000 Voxels par Grain



(b) 5000 Voxels par Grain



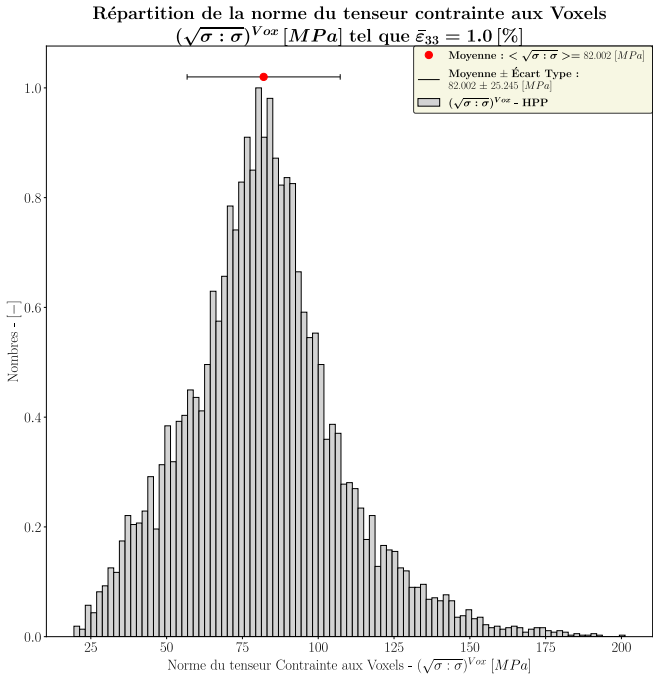
(a) 10000 Voxels par Grain



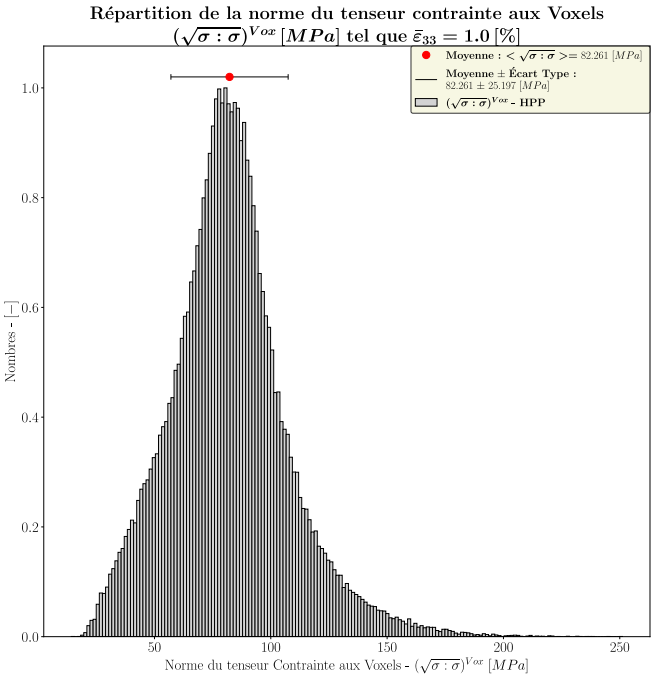
(b) 20000 Voxels par Grain

E.1.3 Histogrammes de fréquence d'une certaine norme des contraintes

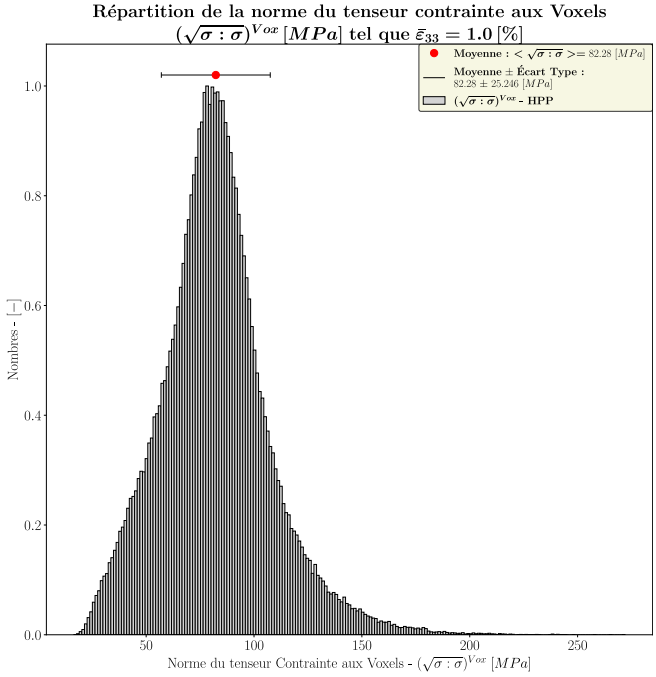
La réponse locale est étudier à l'aide d'histogrammes représentant les fréquences d'une certaine norme des contraintes ($\|\sigma\| = \sqrt{\sigma : \sigma}$), norme des contraintes évaluée pour chacun des voxels. Il est à noter que la fréquence affichée est divisée par le maximum de la fréquence d'apparition obtenue. Ceci permet de comparer les différents histogrammes.



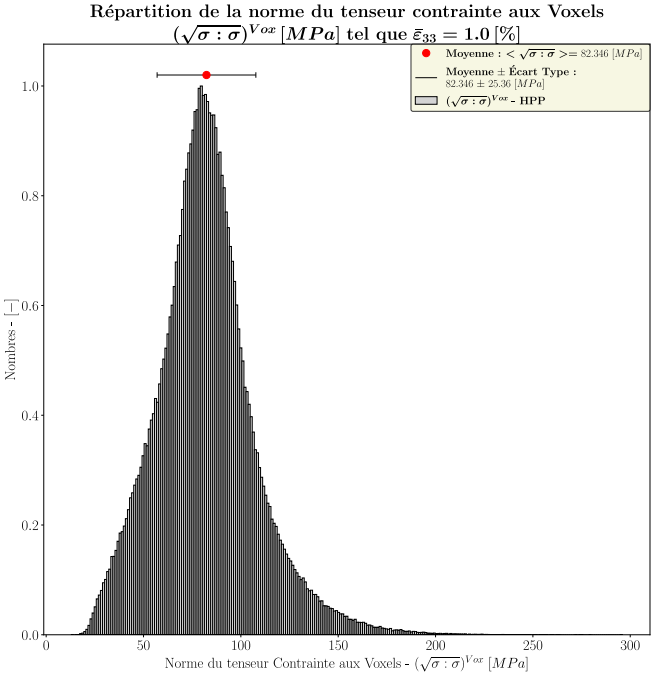
(a) 100 Voxels par Grain



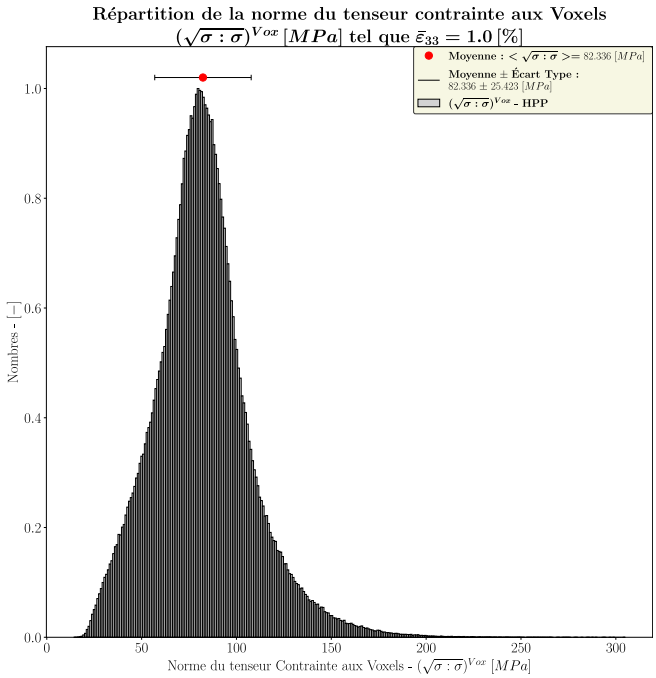
(b) 1000 Voxels par Grain



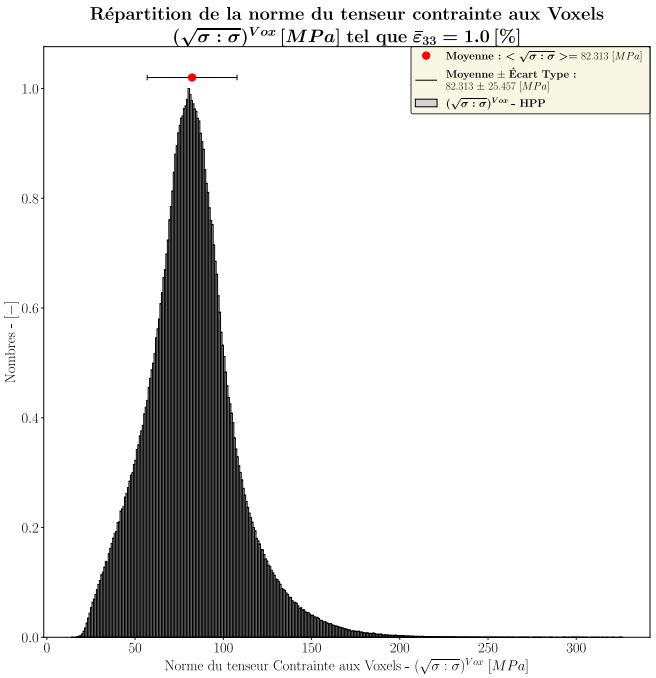
(a) 2000 Voxels par Grain



(b) 5000 Voxels par Grain



(a) 10000 Voxels par Grain



(b) 20000 Voxels par Grain

Dans l'ensemble des cas, la réponse locale et globale se stabilisent pour un nombre de voxels par grain de l'ordre de $\boldsymbol{N_{Vox/G} \gtrsim 5000}$ avec $\boldsymbol{N_{Vox/G}}$ le nombre de voxels par grain considéré. Dans la suite, le nombre de voxels par grain est fixé à $\boldsymbol{N_{Vox/G} = 5000}$.

E.2 Phase II : Étude sur le nombre de Grains par VER et sur le tirage aléatoire.

Dans cette première phase, le travail porte sur le nombre de grain par VER :
$N_{Grain} \in \{25, 100, 500, 1000\}$, avec N_{Grain} le nombre de grain, ainsi que sur l'impact du tirage (9 tirages aléatoires).

E.2.1 Contrainte moyenne et moment d'ordre 2

Dans un premier temps, la figure Fig. E.9 regroupe la variation de la moyenne (sur l'ensemble des tirages) de la norme de la contrainte moyenne ainsi que l'écart type associé (sur l'ensemble des tirages). La figure Fig. E.10 regroupe quant à elle la variation de la moyenne (sur l'ensemble des tirages) d'un certain moment d'ordre 2 ainsi que l'écart type associé (sur l'ensemble des tirages).

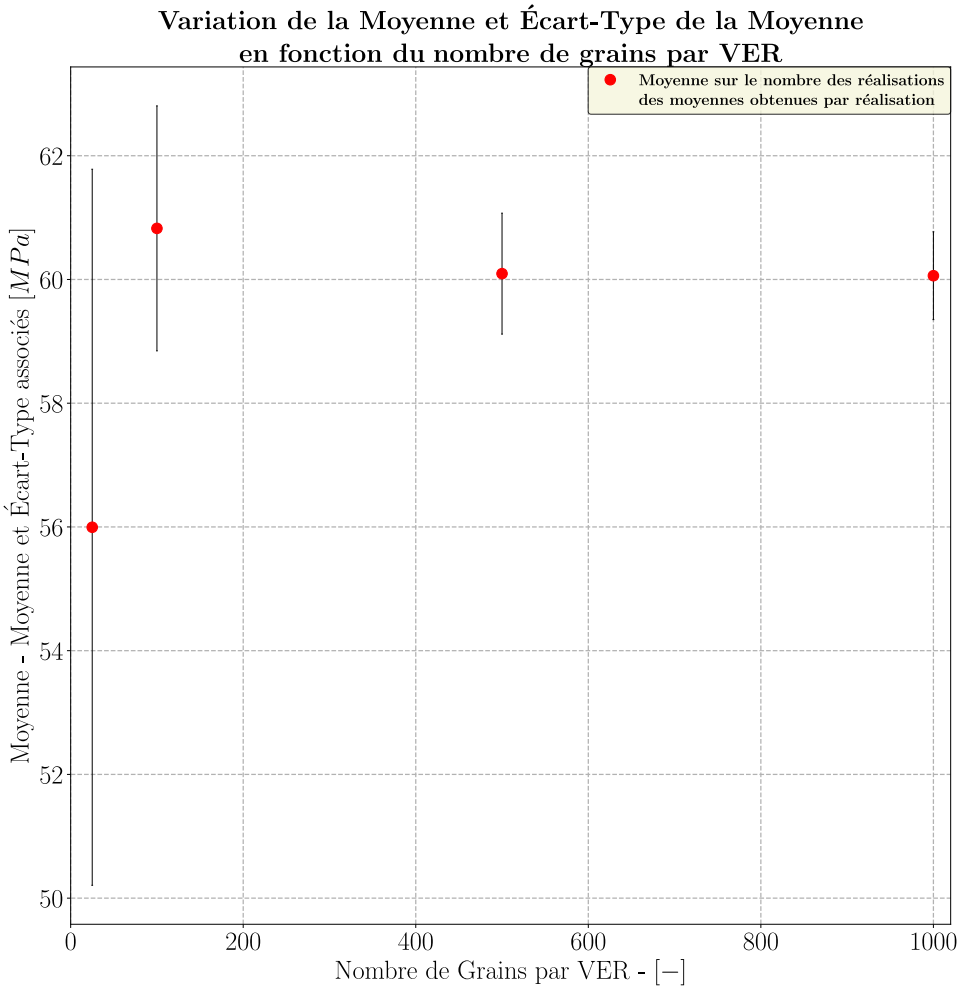


FIGURE E.9 – Moyenne et Écart Type sur l'ensemble des tirages (9) de la contrainte Moyenne définie tel que : $\|\bar{\boldsymbol{\sigma}}\| = \sqrt{\bar{\boldsymbol{\sigma}} : \bar{\boldsymbol{\sigma}}}$ avec $\bar{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{1}{N}\sum_{k}^{N} \boldsymbol{\sigma_k}$ et N le nombre de voxels total, en fonction du nombre de grains par VER.

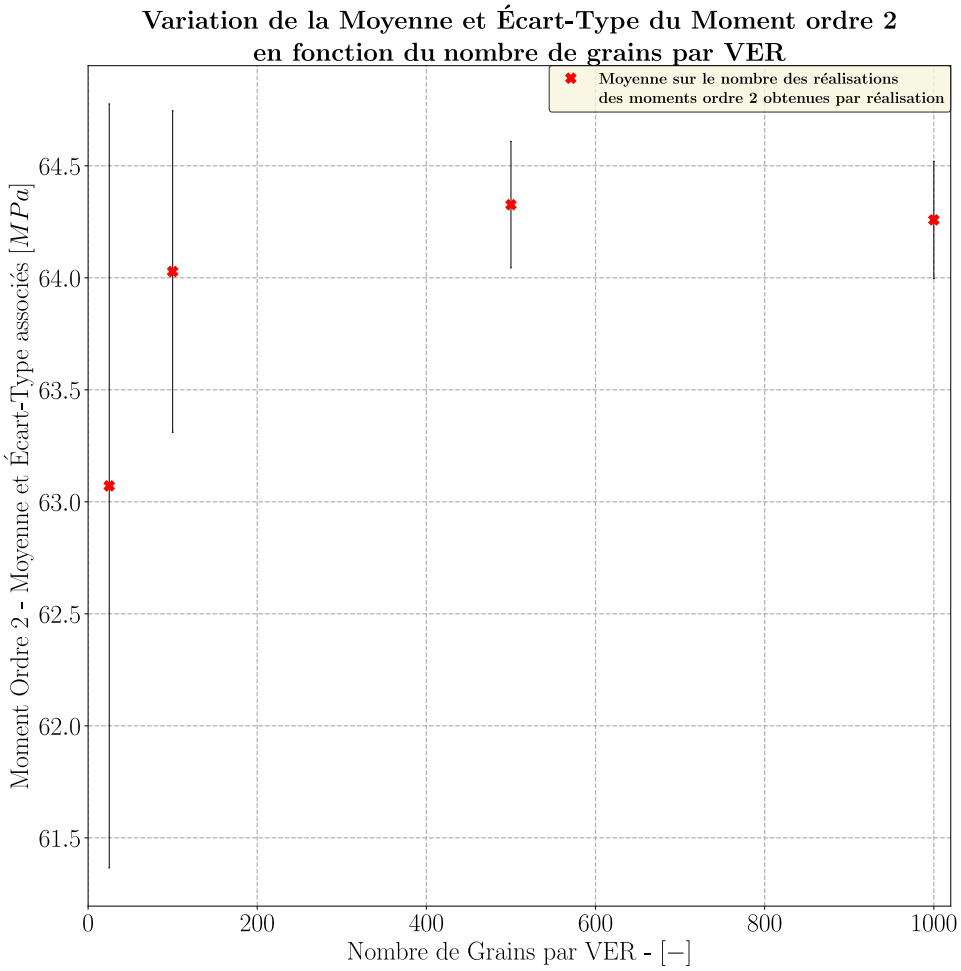


FIGURE E.10 – Moyenne et Écart-Type sur l'ensemble des tirages (9) du Moment d'ordre 2 défini tel que : $\Delta\bar{\sigma} = \sqrt{\frac{1}{N}\sum_{k}^{N}((\sigma_k - \bar{\sigma}) : (\sigma_k - \bar{\sigma}))}$ avec N le nombre de voxels total, en fonction du nombre de grains par VER.

E.2.2 Histogrammes de fréquence des contraintes

Dans un deuxième temps, la réponse locale est étudier à l'aide d'histogrammes représentant la moyenne (sur l'ensemble des tirages) des fréquences de la contrainte dans la direction de sollicitation (σ_{33}), contrainte évaluée pour chacun des voxels. L'écart type (sur l'ensemble des tirages) associé à la fréquence de contrainte obtenue est également affiché.

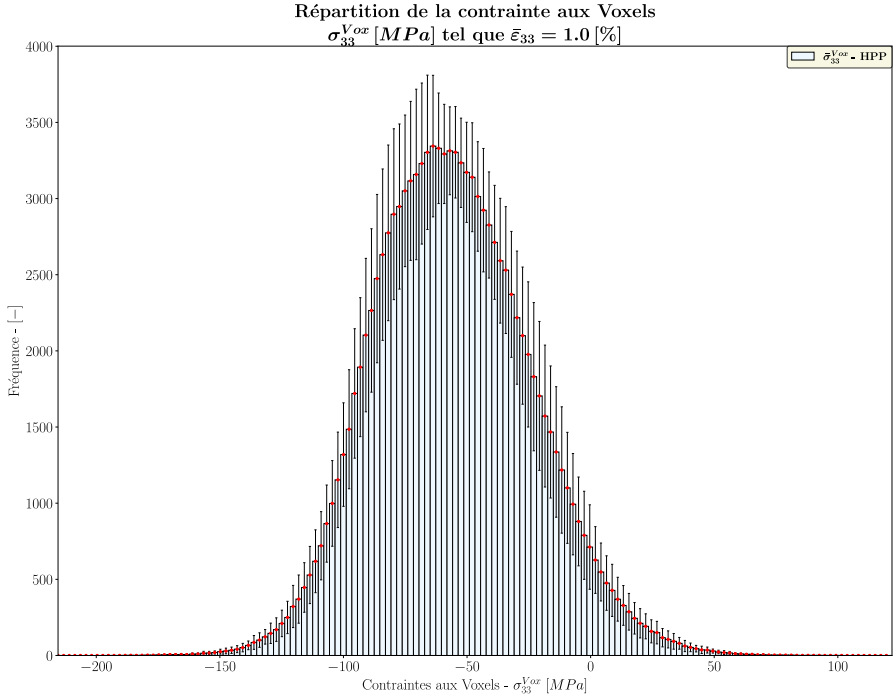


FIGURE E.11 – 25 Grains constituant le VER.

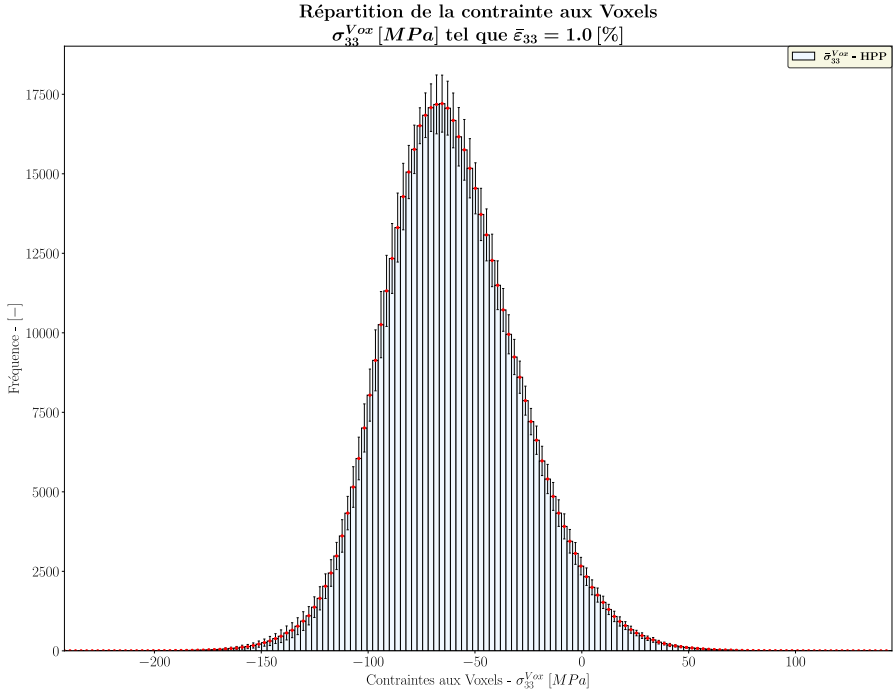


FIGURE E.12 – 100 Grains constituant le VER.

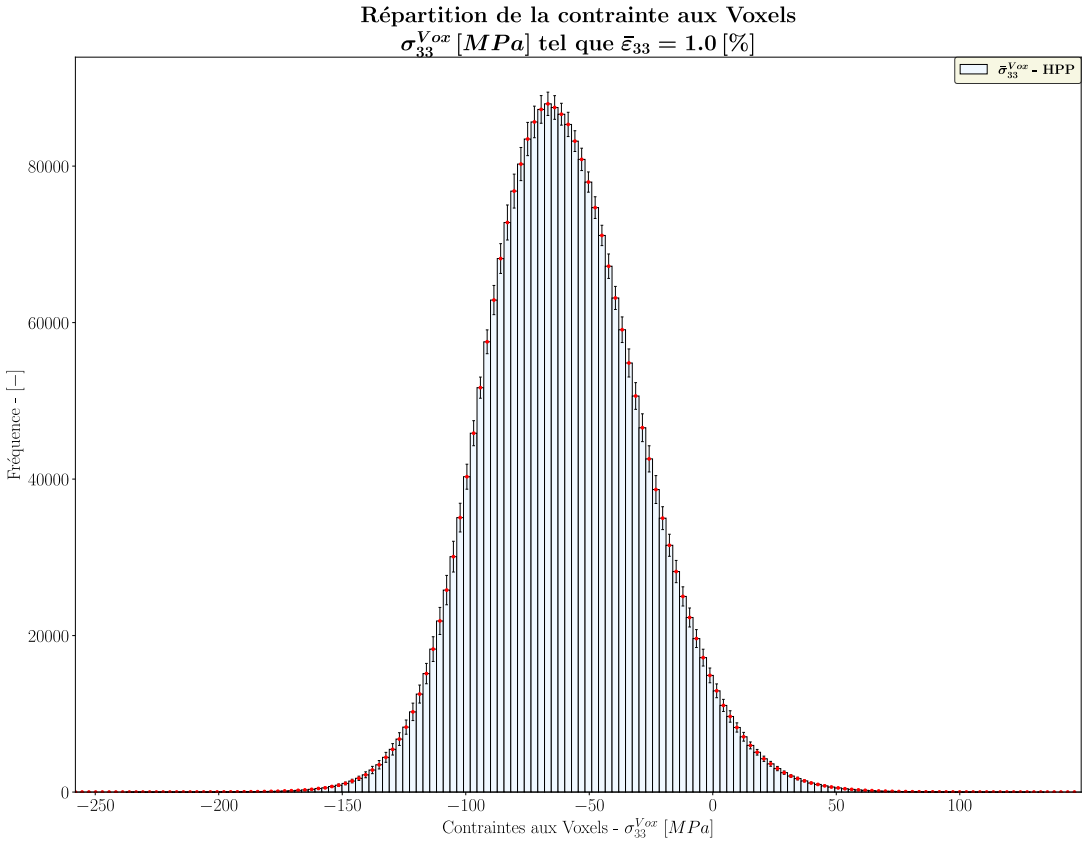


FIGURE E.13 – 500 Grains constituant le VER.

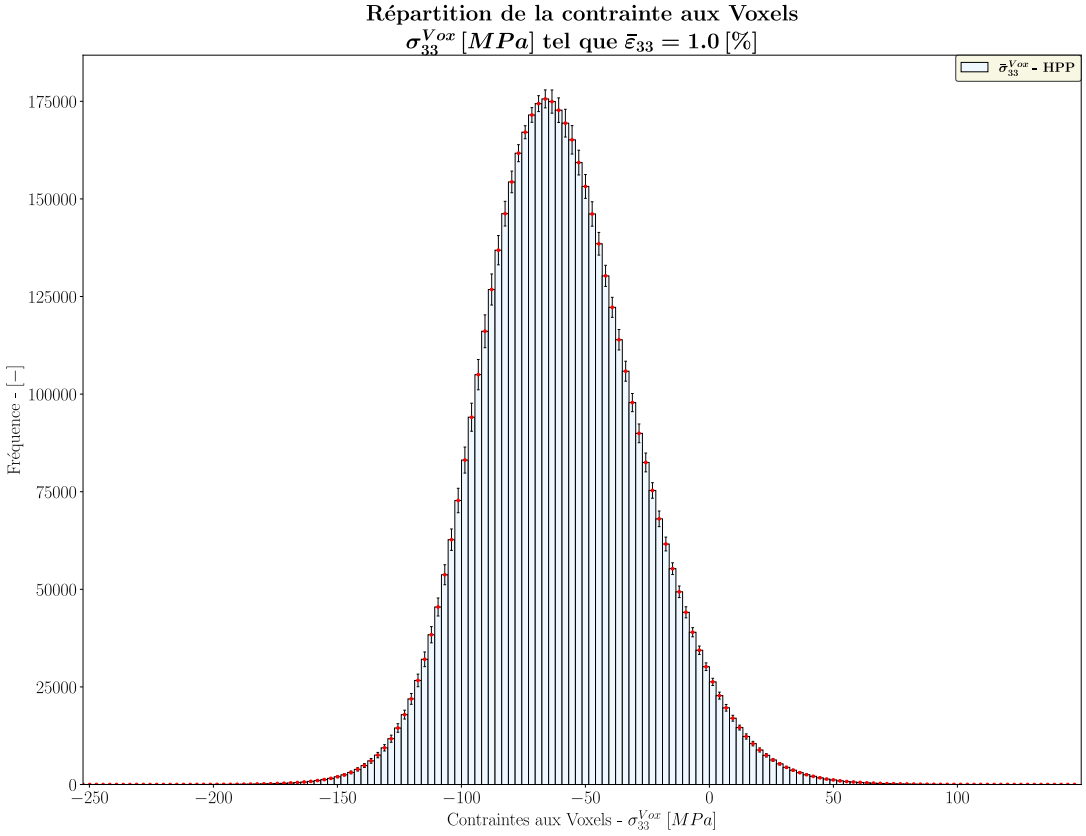


FIGURE E.14 – 1000 Grains constituant le VER.

E.2.3 Histogrammes de fréquence d'une certaine norme des contraintes

La réponse locale est étudier à l'aide d'histogrammes représentant la moyenne (sur l'ensemble des tirages) des fréquences d'une certaine norme des contraintes ($\|\sigma\| = \sqrt{\sigma : \sigma}$), norme des contrainte évaluée pour chacun des voxels. L'écart type (sur l'ensemble des tirages) associé à la fréquence contrainte obtenue est également affiché.

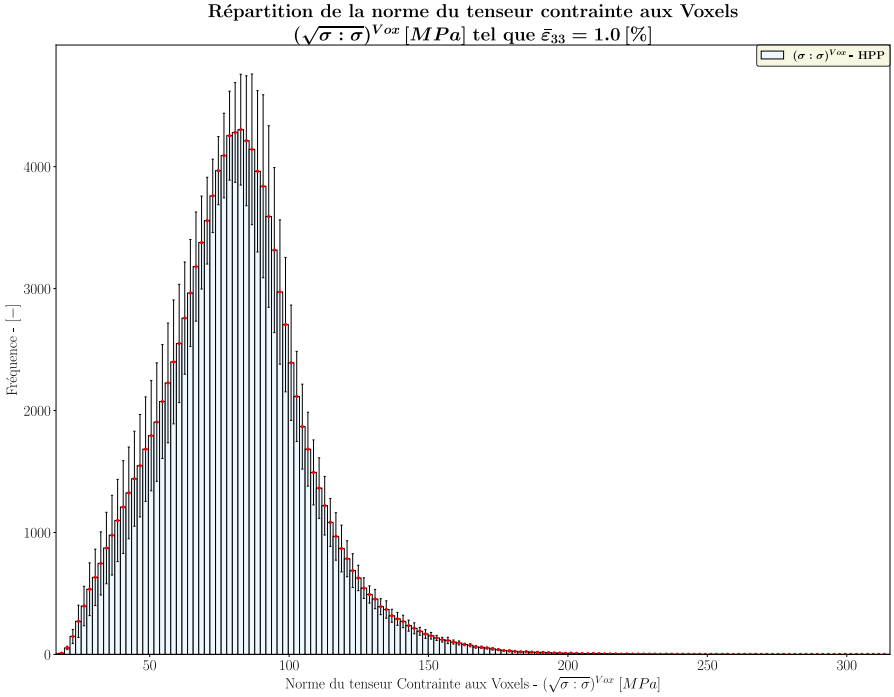


FIGURE E.15 – 25 Grains constituant le VER.

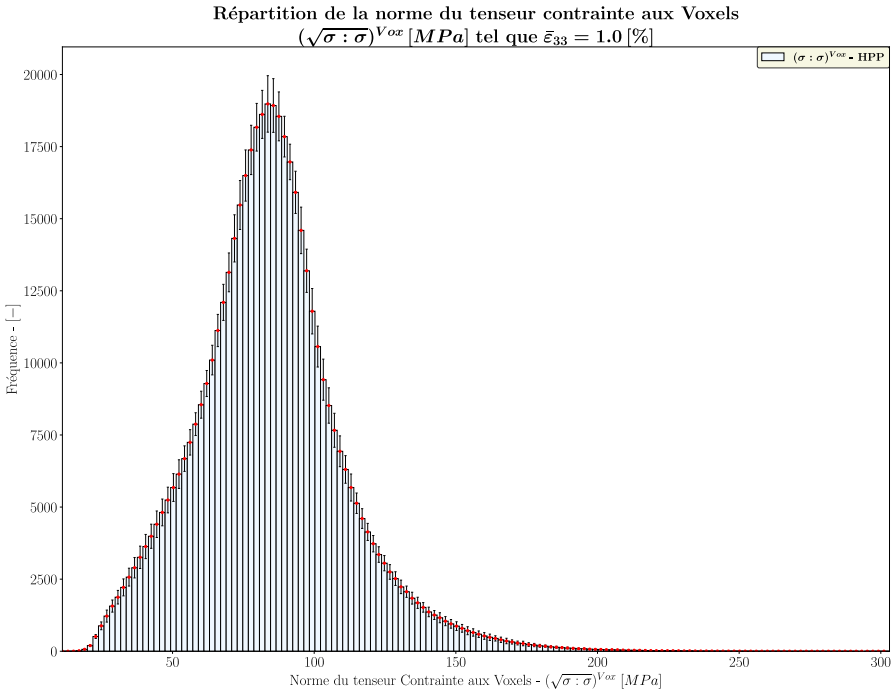


FIGURE E.16 – 100 Grains constituant le VER.

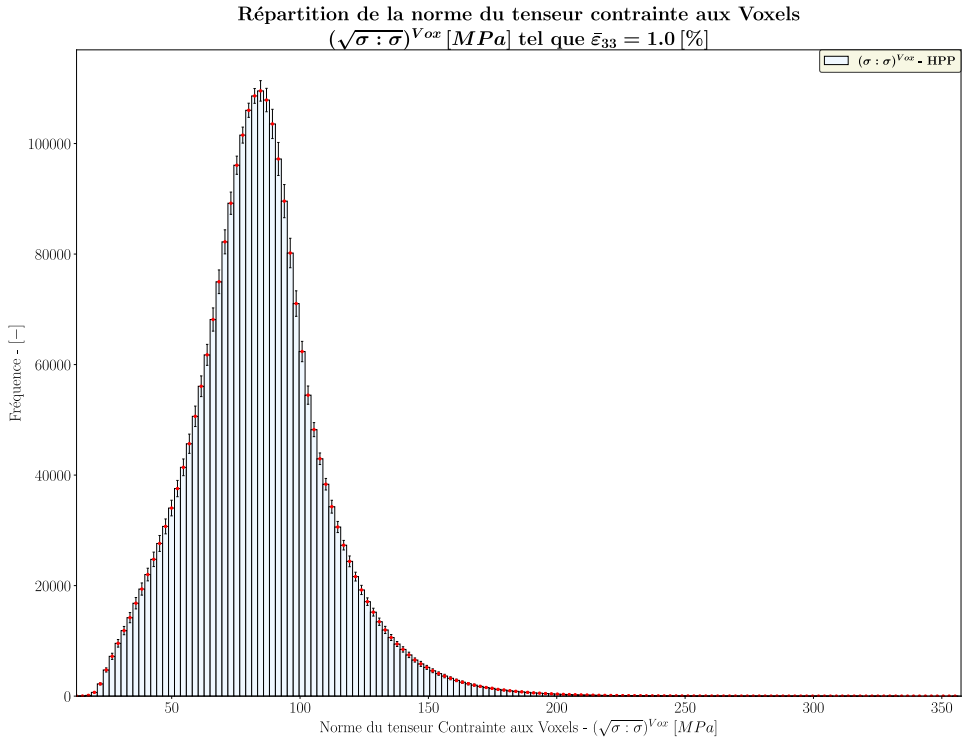


FIGURE E.17 – 500 Grains constituant le VER.

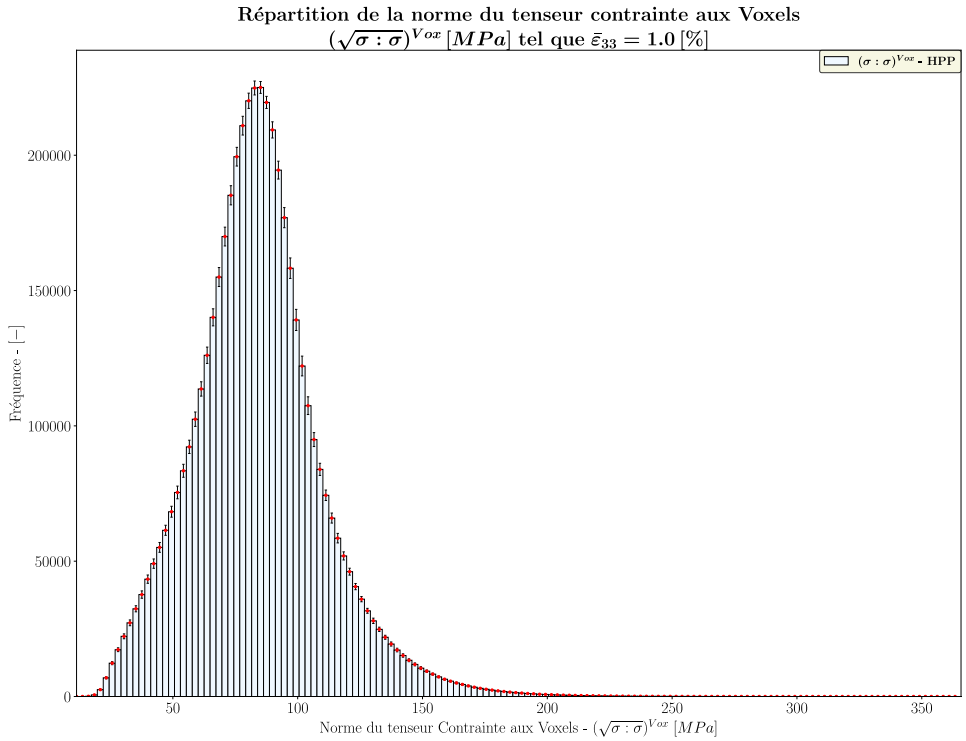


FIGURE E.18 – 1000 Grains constituant le VER.

Dans l'ensemble des cas, la réponse locale et globale se stabilisent pour un nombre de grains de l'ordre de $N_{Grain} \gtrsim 500$ avec N_{Grain} le nombre de grains dans le VER. Les simulations se font avec un nombre de voxels par grain $N_{Vox/G} = 5000$ et un nombre de grains par VER $N_{Grain} = 500$.

F Partie III Chapitre VI Complément sur l'implémentation numérique du modèle NTFA TSO

Les termes intervenant dans l'implémentation numérique (cf. Eq. V.16) du modèle NTFA, appliqué à la loi locale élasto viscoplastique avec écrouissage isotrope, sont explicités dans cette partie.

F.1 Complément sur les différentes expressions intervenant dans l'implémentation numérique du modèle NTFA.

$$
\left|\begin{array}{ll}
\mathcal{A}^{(g)}_{\mathsf{vp},s} - \bar{\mathcal{A}}^{(g)}_{\mathsf{vp},s} & = \left(\boldsymbol{L}:\boldsymbol{A} - <\boldsymbol{L}:\boldsymbol{A}>^{(g)}\right) : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} : \boldsymbol{m}^{(g)}_{s} \\
& \quad + \sum_k \left(\boldsymbol{\rho}^{(k)}_{\mathsf{vp}} - <\boldsymbol{\rho}^{(k)}_{\mathsf{vp}}>^{(g)}\right) : \boldsymbol{m}^{(g)}_{s} \xi^{(k)}_{\mathsf{vp}} \\
& = a^{(s),\mathsf{vp}}_I X_{\mathsf{vp}} \\
X_{\mathsf{vp}} & = \left[\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \cdots \xi^{(k)}_{\mathsf{vp}} \cdots\right] \\
C^{(g)}\left(\mathcal{A}^{(g)}_{\mathsf{vp},s}\right) & = X^T_{\mathsf{vp}} P^{(s),\mathsf{vp}} X_{\mathsf{vp}} \text{ avec } P^{(s),\mathsf{vp}}_{IJ} = <a^{(s),\mathsf{vp}}_I a^{(s),\mathsf{vp}}_J>^{(g)} \\
\frac{1}{2}\frac{\partial C^{(g)}}{\partial \xi^{(k)}_{\mathsf{vp}}}(\mathcal{A}^{(g)}_{\mathsf{vp},s}) & = P^{(s),\mathsf{vp}} X_{\mathsf{vp}} \left(6 + k^{\text{ième}} \text{ composante}\right)
\end{array}\right.
$$

$$
\left|\begin{array}{ll}
\mathcal{A}^{(g)}_{\mathsf{p}} - \bar{\mathcal{A}}^{(g)}_{\mathsf{p}} & = -h \sum_k \left(\mu^{(k)}_{\mathsf{p}} \chi^{(g)} - <\mu^{(k)}_{\mathsf{p}}>^{(g)}\right) \xi^{(k)}_{\mathsf{p}} \\
& = a^{\mathsf{p}}_I X_{\mathsf{p}} \\
X_{\mathsf{p}} & = \left[\cdots \xi^{(k)}_{\mathsf{p}} \cdots\right] \\
C^{(g)}\left(\mathcal{A}^{(g)}_{\mathsf{p}}\right) & = X^T_{\mathsf{p}} P^{\mathsf{p}} X_{\mathsf{p}} \text{ avec } P^{\mathsf{p}}_{IJ} = <a^{\mathsf{p}}_I a^{\mathsf{p}}_J>^{(g)} \\
\frac{1}{2}\frac{\partial C^{(g)}}{\partial \xi^{(k)}_{\mathsf{p}}}(\mathcal{A}^{(g)}_{\mathsf{p}}) & = P^{\mathsf{p}} X_{\mathsf{p}} \left(k^{\text{ième}} \text{ composante}\right)
\end{array}\right. \tag{F.1}
$$

$$
\left|\begin{array}{ll}
C^{(g)}\left(\mathcal{A}^{(g)}_{\mathsf{vp},s}, \mathcal{A}^{(g)}_{\mathsf{p}}\right) & = X^T_{\mathsf{vp}} P^{(s),\mathsf{vp,p}} X_{\mathsf{p}} \text{ avec } P^{(s),\mathsf{vp,p}}_{IJ} = <a^{(s),\mathsf{vp}}_I a^{\mathsf{p}}_J>^{(g)} \\
\frac{\partial C^{(g)}}{\partial \xi^{(k)}_{\mathsf{vp}}}\left(\mathcal{A}^{(g)}_{\mathsf{vp},s}, \mathcal{A}^{(g)}_{\mathsf{p}}\right) & = P^{(s),\mathsf{vp,p}} X_{\mathsf{p}} \left(6 + k^{\text{ième}} \text{ composante}\right) \\
\frac{\partial C^{(g)}}{\partial \xi^{(k)}_{\mathsf{p}}}\left(\mathcal{A}^{(g)}_{\mathsf{vp},s}, \mathcal{A}^{(g)}_{\mathsf{p}}\right) & = X^T_{\mathsf{vp}} P^{(s),\mathsf{vp,p}} \left(k^{\text{ième}} \text{ composante}\right) \\
P^{(s),\mathsf{vp,p}} & \text{Tenseur 2 : } \left([M_{\mathsf{vp}} + 6]\ M_{\mathsf{p}}\right)
\end{array}\right.
$$

$$
\left|
\begin{array}{ll}
\dot{\gamma}_s^{\mathsf{vp}}\left(\mathcal{A}_{\mathsf{vp}},\mathcal{A}_{\mathsf{p}}\right) & = \dot{\gamma}_i^0 \left(\dfrac{|\mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}|}{-\mathcal{A}_{\mathsf{p},i}}\right)^{n_i} sgn\left(\mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}\right)
\end{array}
\right|
$$

$$
\left|
\begin{array}{ll}
\dfrac{\partial \dot{\gamma}_s^{\mathsf{vp}}}{\partial \mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}}\left(\mathcal{A}_{\mathsf{vp}},\mathcal{A}_{\mathsf{p}}\right) & = \dot{\gamma}_i^0 \dfrac{n_i}{-\mathcal{A}_{\mathsf{p},i}} \left(\dfrac{|\mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}|}{-\mathcal{A}_{\mathsf{p},i}}\right)^{n_i-1} \\
\dfrac{\partial^2 \dot{\gamma}_s^{\mathsf{vp}}}{\partial \mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}^2}\left(\mathcal{A}_{\mathsf{vp}},\mathcal{A}_{\mathsf{p}}\right) & = \dot{\gamma}_i^0 \dfrac{n_i\left(n_i-1\right)}{\mathcal{A}_{\mathsf{p},i}^2} \left(\dfrac{|\mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}|}{-\mathcal{A}_{\mathsf{p},i}}\right)^{n_i-2} sgn\left(\mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}\right)
\end{array}
\right|
$$

$$
\left|
\begin{array}{ll}
\dfrac{\partial \dot{\gamma}_s^{\mathsf{vp}}}{\partial \mathcal{A}_{\mathsf{p}}}\left(\mathcal{A}_{\mathsf{vp}},\mathcal{A}_{\mathsf{p}}\right) & = \dot{\gamma}_i^0 \dfrac{n_i}{-\mathcal{A}_{\mathsf{p},i}} \left(\dfrac{|\mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}|}{-\mathcal{A}_{\mathsf{p},i}}\right)^{n_i} sgn\left(\mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}\right) \\
\dfrac{\partial^2 \dot{\gamma}_s^{\mathsf{vp}}}{\partial \mathcal{A}_{\mathsf{p}}^2}\left(\mathcal{A}_{\mathsf{vp}},\mathcal{A}_{\mathsf{p}}\right) & = \dot{\gamma}_i^0 \dfrac{n_i\left(n_i+1\right)}{\mathcal{A}_{\mathsf{p},i}^2} \left(\dfrac{|\mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}|}{-\mathcal{A}_{\mathsf{p},i}}\right)^{n_i} sgn\left(\mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}\right)
\end{array}
\right|
\tag{F.2}
$$

$$
\left|
\begin{array}{ll}
\dfrac{\partial^2 \dot{\gamma}_s^{\mathsf{vp}}}{\partial \mathcal{A}_{\mathsf{p}} \partial \mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}}\left(\mathcal{A}_{\mathsf{vp}},\mathcal{A}_{\mathsf{p}}\right) & = \dot{\gamma}_i^0 \dfrac{n_i^2}{\mathcal{A}_{\mathsf{p},i}^2} \left(\dfrac{|\mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}|}{-\mathcal{A}_{\mathsf{p},i}}\right)^{n_i-1}
\end{array}
\right|
$$

$$
\left|
\begin{array}{ll}
\dfrac{\partial \bar{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp},s}^{(g)}}{\partial \xi_{\mathsf{vp}}^{(k)}} & =< \boldsymbol{\rho}_{\mathsf{vp}}^{(\boldsymbol{k})} >^{(g)} \colon \boldsymbol{m_s}^{(g)} \\
\boldsymbol{a}^{(\boldsymbol{k})} & =< \boldsymbol{\mu}_{\mathsf{vp}}^{(\boldsymbol{k})} : \boldsymbol{L} : \boldsymbol{A} >
\end{array}
\right|
$$

$$
\left|
\begin{array}{ll}
\dot{\gamma}_s^{\mathsf{p}}\left(\mathcal{A}_{\mathsf{vp}},\mathcal{A}_{\mathsf{p}}\right) & = |\dot{\gamma}_s^{\mathsf{vp}}|
\end{array}
\right|
$$

$$
\left|
\begin{array}{ll}
\dfrac{\partial \dot{\gamma}_s^{\mathsf{p}}}{\partial \mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}}\left(\mathcal{A}_{\mathsf{vp}},\mathcal{A}_{\mathsf{p}}\right) & = \dfrac{\partial \dot{\gamma}_s^{\mathsf{vp}}}{\partial \mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}} sgn\left(\mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}\right) \\
\dfrac{\partial^2 \dot{\gamma}_s^{\mathsf{p}}}{\partial \mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}^2}\left(\mathcal{A}_{\mathsf{vp}},\mathcal{A}_{\mathsf{p}}\right) & = \dfrac{\partial^2 \dot{\gamma}_s^{\mathsf{vp}}}{\partial \mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}^2} sgn\left(\mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}\right)
\end{array}
\right|
$$

$$
\left|
\begin{array}{ll}
\dfrac{\partial \dot{\gamma}_s^{\mathsf{p}}}{\partial \mathcal{A}_{\mathsf{p}}}\left(\mathcal{A}_{\mathsf{vp}},\mathcal{A}_{\mathsf{p}}\right) & = \dfrac{\partial \dot{\gamma}_s^{\mathsf{vp}}}{\partial \mathcal{A}_{\mathsf{p}}} sgn\left(\mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}\right) \\
\dfrac{\partial^2 \dot{\gamma}_s^{\mathsf{p}}}{\partial \mathcal{A}_{\mathsf{p}}^2}\left(\mathcal{A}_{\mathsf{vp}},\mathcal{A}_{\mathsf{p}}\right) & = \dfrac{\partial^2 \dot{\gamma}_s^{\mathsf{vp}}}{\partial \mathcal{A}_{\mathsf{p}}^2} sgn\left(\mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}\right)
\end{array}
\right|
\tag{F.3}
$$

$$
\left|
\begin{array}{ll}
\dfrac{\partial^2 \dot{\gamma}_s^{\mathsf{p}}}{\partial \mathcal{A}_{\mathsf{p}} \partial \mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}}\left(\mathcal{A}_{\mathsf{vp}},\mathcal{A}_{\mathsf{p}}\right) & = \dfrac{\partial^2 \dot{\gamma}_s^{\mathsf{vp}}}{\partial \mathcal{A}_{\mathsf{p}} \partial \mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}} sgn\left(\mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}\right)
\end{array}
\right|
$$

$$
\left|
\begin{array}{ll}
\dfrac{\partial \bar{\mathcal{A}}_{\mathsf{p}}^{(g)}}{\partial \xi_{\mathsf{p}}^{(k)}} & = -h \ < \mu_{\mathsf{p}}^{(k)} >^{(g)}
\end{array}
\right|
$$

F.2 Valeurs et données numériques intervenant dans l'implémentation numérique

$$
\text{Avec :}\quad \left\|\begin{array}{ll}
r_i & = \tau_i^0(T,\dot{\bar{\varepsilon}}) + h_i(T,\dot{\bar{\varepsilon}})\; p_i,\; \mathcal{A}_{\mathsf{p},i} = -r_i \\
\dot{p}_i & = \displaystyle\sum_{s\in S_i} \dot{\gamma}_s^{\mathsf{p}},\; \dot{\gamma}_s^{\mathsf{p}} = |\dot{\gamma}_s^{\mathsf{vp}}| \\
i & \text{l'ensemble des familles de glissement, } i \in \{\{100\},\{110\}\} \\
S_i & \text{l'ensemble des systèmes de glissement appartenant à la famille } i \\
s & \text{l'ensemble des systèmes de glissement}
\end{array}\right.
$$

$$
\begin{aligned}
\tau_i^0(T,\dot{\bar{\varepsilon}}) &= A_i(\dot{\bar{\varepsilon}})\; exp\,(-b_i\; T) \\
A_i(\dot{\bar{\varepsilon}}) &= a_i^0\; log_{10}(\dot{\bar{\varepsilon}}) + a_i^1
\end{aligned}
$$

$$
\text{Numériquement :}\quad \left\|\begin{array}{lll}
a^0_{\{100\}} & = 19.49711133 & \\
a^1_{\{100\}} & = 202.42143199 & \\
b_{\{100\}} & = 1.21548301\; 10^{-3} &
\end{array}\right\| \left\|\begin{array}{lll}
a^0_{\{110\}} & = 77.18803512 & [MPa] \\
a^1_{\{110\}} & = 601.46741726 & [MPa] \\
b_{\{110\}} & = 1.32047924\; 10^{-3} & [^\circ C]^{-1}
\end{array}\right. \qquad \text{(F.4)}
$$

$$
h(T,\dot{\bar{\varepsilon}}) = \frac{a^{\mathsf{h}}\; ln\left(b^{\mathsf{h}}\; \dot{\bar{\varepsilon}} + f^{\mathsf{h}}\right)}{\left(c^{\mathsf{h}}\; T + d^{\mathsf{h}}\right)^{e^{\mathsf{h}}}}
$$

$$
\text{Numériquement :}\quad \left\|\begin{array}{lll}
a^{\mathsf{h}} & = 1.01600268\; 10^5 & [MPa] \\
b^{\mathsf{h}} & = 3.76964964\; 10^5 & [s]^{-1} \\
c^{\mathsf{h}} & = 4.99210510\; 10^{-3} & [^\circ C]^{-1}
\end{array}\right| \left\|\begin{array}{lll}
d^{\mathsf{h}} & = 1.21527632\; 10^{-1} & [-] \\
e^{\mathsf{h}} & = 5. & [-] \\
f^{\mathsf{h}} & = 2.58830822\; 10^2 & [-]
\end{array}\right.
$$

$$
\text{Élasticité :}\quad \left\|\begin{array}{lll}
 & T = 1600\,[^\circ C] & \\
E\,[MPa] & \nu\,[-] & G\,[MPa] \\
33408. & 0.2800 & 8532.
\end{array}\right.
$$

Famille {100}

$\boldsymbol{n_s}$	$\boldsymbol{b_s}$	$\boldsymbol{m_s}$
$[1,0,0]$	$\left[0, \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}\right]$	$\begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{2\sqrt{2}} & \frac{1}{2\sqrt{2}} \\ \frac{1}{2\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ \frac{1}{2\sqrt{2}} & 0 & 0 \end{bmatrix}$
$[0,1,0]$	$\left[\frac{1}{\sqrt{2}}, 0, \frac{1}{\sqrt{2}}\right]$	$\begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{2\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{2\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{2\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{2\sqrt{2}} & 0 \end{bmatrix}$
$[0,0,1]$	$\left[\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}, 0\right]$	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & \frac{1}{2\sqrt{2}} \\ 0 & 0 & \frac{1}{2\sqrt{2}} \\ \frac{1}{2\sqrt{2}} & \frac{1}{2\sqrt{2}} & 0 \end{bmatrix}$
$[1,0,0]$	$\left[0, \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{-1}{\sqrt{2}}\right]$	$\begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{2\sqrt{2}} & \frac{-1}{2\sqrt{2}} \\ \frac{1}{2\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ \frac{-1}{2\sqrt{2}} & 0 & 0 \end{bmatrix}$
$[0,1,0]$	$\left[\frac{1}{\sqrt{2}}, 0, \frac{-1}{\sqrt{2}}\right]$	$\begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{2\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{2\sqrt{2}} & 0 & \frac{-1}{2\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{-1}{2\sqrt{2}} & 0 \end{bmatrix}$
$[0,0,1]$	$\left[\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{-1}{\sqrt{2}}, 0\right]$	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & \frac{1}{2\sqrt{2}} \\ 0 & 0 & \frac{-1}{2\sqrt{2}} \\ \frac{1}{2\sqrt{2}} & \frac{-1}{2\sqrt{2}} & 0 \end{bmatrix}$

(F.5)

Famille {110}

$\boldsymbol{n_s}$	$\boldsymbol{b_s}$	$\boldsymbol{m_s}$
$\left[\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}, 0\right]$	$\left[\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{-1}{\sqrt{2}}, 0\right]$	$\begin{bmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{-1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$
$\left[\frac{1}{\sqrt{2}}, 0, \frac{1}{\sqrt{2}}\right]$	$\left[\frac{1}{\sqrt{2}}, 0, \frac{-1}{\sqrt{2}}\right]$	$\begin{bmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{-1}{2} \end{bmatrix}$
$\left[0, \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}\right]$	$\left[0, \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{-1}{\sqrt{2}}\right]$	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{-1}{2} \end{bmatrix}$
$\left[\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{-1}{\sqrt{2}}, 0\right]$	$\left[\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}, 0\right]$	$\begin{bmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{-1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$
$\left[\frac{1}{\sqrt{2}}, 0, \frac{-1}{\sqrt{2}}\right]$	$\left[\frac{1}{\sqrt{2}}, 0, \frac{1}{\sqrt{2}}\right]$	$\begin{bmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{-1}{2} \end{bmatrix}$
$\left[0, \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{-1}{\sqrt{2}}\right]$	$\left[0, \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}\right]$	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{-1}{2} \end{bmatrix}$

(F.6)

G Partie III Chapitre V
Loi locale monocristalline : cadre des matériaux standard généralisés

Ce chapitre a pour but d'étudier les potentiels de force issus du processus d'identification inverse. Du fait de l'existence de deux potentiels de force, la loi de comportement étudié ne s'inscrit pas dans le cadre des matériaux standard généralisés. Néanmoins, il est possible de vérifier si les potentiels de force ainsi défini respectent ou non les hypothèses de ce cadre.

G.1 Formalisme Cosinus Hyperbolique

Les potentiels de force issu du processus d'identification inverse sont calculable analytiquement et leur expression respective sont rappelées Eq. G.1.

$$
\begin{aligned}
\psi_{\mathsf{vp}}(\boldsymbol{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp}}, \mathcal{A}_{\mathsf{p},i}) &= \sum_s \psi_{\mathsf{vp},s}(\boldsymbol{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp}}, \mathcal{A}_{\mathsf{p},i}) \\
\psi_{\mathsf{vp},s}(\boldsymbol{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp}}, \mathcal{A}_{\mathsf{p},i}) &= \dot{\gamma}_i^0 \, \frac{(-\mathcal{A}_{\mathsf{p},i})}{n_i + 1} \left(\frac{|\mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}|}{-\mathcal{A}_{\mathsf{p},i}} \right)^{n_i+1} \\
\hline
\psi_{\mathsf{p}}(\boldsymbol{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp}}, \mathcal{A}_{\mathsf{p},i}) &= \sum_s \psi_{\mathsf{p},s}(\boldsymbol{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp}}, \mathcal{A}_{\mathsf{p},i}) \\
\psi_{\mathsf{p},s}(\boldsymbol{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp}}, \mathcal{A}_{\mathsf{p},i}) &= \dot{\gamma}_i^0 \, \frac{|\mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}|}{(n_i - 1)} \left(\frac{|\mathcal{A}_{\mathsf{vp},s}|}{-\mathcal{A}_{\mathsf{p},i}} \right)^{n_i-1} \\
\hline
\text{Avec :} \quad & \left| \begin{aligned} \mathcal{A}_{\mathsf{p},i} &= -r_i \\ \mathcal{A}_{\mathsf{vp},s} &= \boldsymbol{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp}} : \boldsymbol{m_s} \end{aligned} \right. \\
\text{Où :} \quad & \left| \begin{aligned} r_i &= \tau_i^0 + h_i \, p_i \\ \dot{p}_i &= \sum_{s \in S_i} \dot{\gamma}_s^{\mathsf{p}} \left(\boldsymbol{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp}}, \mathcal{A}_{\mathsf{p},i} \right) \end{aligned} \right.
\end{aligned}
\tag{G.1}
$$

En remarquant que $-\mathcal{A}_{\mathsf{p},i} > 0$ les expressions des potentiels de forces, il apparait clairement que les deux potentiels vérifient les deux hypothèses suivantes à savoir $(\mathcal{H}_1)$ et $(\mathcal{H}_2)$ de Eq. V.2. En effet les deux potentiels de force (cf. Eq. G.1), qui sont des fonctions à deux variables, sont positifs sur leurs ensemble de définition et nuls pour le couple $(0, 0)$.

$$
\begin{array}{rl}
\text{Soit } f \in \mathcal{C}^2(U^2, \mathbb{R}) & \\
f : & \left| \begin{array}{ll} U^2 & \longrightarrow \mathbb{R} \\ (x,y) & \longmapsto f(x,y) \end{array} \right. \\
H(f) = & \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} & \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r & s \\ s & t \end{pmatrix} \\
\text{Avec :} & \left| \; H \text{ la matrice Hessienne de } f \right. \\
\textbf{1. } rt - s^2 > 0 & \left\| \begin{array}{ll} r > 0 & f \text{ est convexe} \\ r < 0 & f \text{ est concave} \end{array} \right. \\
\textbf{2. } rt - s^2 < 0 & \left\| \; \text{Point col} \right. \\
\textbf{3. } rt - s^2 = 0 & \left\| \; \text{On ne peut rien dire} \right.
\end{array}
\tag{G.2}
$$

Il reste à vérifier l'hypothèse de convexité pour chacun des potentiels. Étant donné que ce sont des fonctions à deux variables, il faut expliciter leur Hessienne puis calculer le déterminant de cette matrice.

$$
\begin{aligned}
f : & \left| \begin{array}{ll} U^2 & \longrightarrow \mathbb{R} \\ (x,y) & \longmapsto a \; \dfrac{-y}{n+1} \; \left(\dfrac{|x|}{-y} \right)^{n+1} \end{array} \right. \\
f_{,x} &= a \; \left(\frac{|x|}{-y} \right)^{n} \; sgn(x) \\
f_{,xx} &= a \; \frac{n}{-y} \; \left(\frac{|x|}{-y} \right)^{n-1} \\
f_{,xy} &= a \; \frac{n|x|}{y^2} \; \left(\frac{|x|}{-y} \right)^{n-1} \; sgn(x) \\
&= a \; \frac{n}{-y} \; \left(\frac{|x|}{-y} \right)^{n} \; sgn(x) \\
f_{,y} &= -a \; \frac{1}{n+1} \left(\frac{|x|}{-y} \right)^{n+1} + a \; (-y) \; \frac{|x|}{y^2} \; \left(\frac{|x|}{-y} \right)^{n} \\
&= a \; \frac{n}{n+1} \; \left(\frac{|x|}{-y} \right)^{n+1} \\
f_{,yy} &= a \; n \; \frac{|x|}{-y} \; \left(\frac{|x|}{-y} \right)^{n} \\
&= a \; \frac{n}{-y} \; \left(\frac{|x|}{-y} \right)^{n+1} \\
rt &= a^2 \; \frac{n^2}{y^2} \; \left(\frac{|x|}{-y} \right)^{2n} \\
s^2 &= a^2 \; \frac{n^2}{y^2} \; \left(\frac{|x|}{-y} \right)^{2n} \\
det(H(f)(x,y)) &= 0
\end{aligned}
\tag{G.3}
$$

$$
\begin{aligned}
f : \left| \begin{array}{ll} U^2 & \longrightarrow \mathbb{R} \\ (x,y) & \longmapsto a\ \dfrac{|x|}{n-1}\ \left(\dfrac{|x|}{-y}\right)^{n-1} \end{array} \right. \\
f_{,x} &= a\ \frac{n}{n-1}\ \left(\frac{|x|}{-y}\right)^{n-1}\ sgn(x) \\
f_{,xx} &= a\ \frac{n}{-y}\ \left(\frac{|x|}{-y}\right)^{n-2} \\
f_{,xy} &= a\ \frac{n}{-y}\ \left(\frac{|x|}{-y}\right)^{n-1}\ sgn(x) \\
f_{,y} &= a\ \left(\frac{|x|}{-y}\right)^{n} \\
f_{,yy} &= a\ \frac{n}{-y}\ \left(\frac{|x|}{-y}\right)^{n} \\
rt &= a^2\ \frac{n^2}{y^2}\ \left(\frac{|x|}{-y}\right)^{2n-2} \\
s^2 &= a^2\ \frac{n^2}{y^2}\ \left(\frac{|x|}{-y}\right)^{2n-2} \\
det(H(f)(x,y)) &= 0
\end{aligned}
\tag{G.4}
$$

Pour les deux potentiels de forces étudiés, le déterminant de la Hessienne est nul en s'appuyant sur Eq. G.3 et Eq. G.4. En s'appuyant sur Eq. G.2, il n'est pas possible de conclure sur la convexité des potentiels.

Néanmoins, en étudiant seulement l'expression de $f_{,xx}$ de Eq. G.3 et $f_{,yy}$ de Eq. G.4, il est possible de voir que les potentiels de forces sont convexe par rapport à leur variable principale. C'est-à-dire, en restreignant ψ_{vp} à sa première variable et ψ_{p} à sa seconde variable, il apparait que ψ_{vp} est convexe par rapport à $\boldsymbol{\mathcal{A}}_{\mathsf{vp}}$ et ψ_{p} par rapport à $\mathcal{A}_{\mathsf{p}}$.