HAL open science

Modèle numérique micromécanique d'agrégat polycristallin pour le comportement des combustibles oxydes

Julien Pacull, Bruno Michel, Étienne Castelier, Olivier Débordes

To cite this version:

Julien Pacull, Bruno Michel, Étienne Castelier, Olivier Débordes. Modèle numérique micromécanique d'agrégat polycristallin pour le comportement des combustibles oxydes. 9e Colloque national en calcul des structures, CSMA, May 2009, Giens, France. hal-01412123

HAL Id: hal-01412123

https://hal.science/hal-01412123v1

Submitted on 8 Dec 2016

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.

Distributed under a Creative Commons Attribution 4.0 International License

Modèle numérique micromécanique d'agrégat polycristallin pour le comportement des combustibles oxydes

J. Pacull[1,2], B. Michel[1], E. Castelier[1], O. Débordes[2]

[1]CEA, DEN, DEC/LSC, 13108 Saint-Paul-Lez-durance, France.
{julien.pacull, bruno.michel, etienne.castelier}@cea.fr

[2] Laboratoire de Mécanique et d'Acoustique (CNRS Marseille)
Ecole Centrale Marseille - 38 rue Joliot Curie 13451 Marseille Cedex 20
olivier.debordes@ec-marseille.fr

Résumé — Le présent travail s'inscrit dans le cadre de la plateforme logicielle PLEIADES développée conjointement par le CEA et EDF pour la simulation du comportement des combustibles nucléaires. Une méthode de génération de modèles éléments finis d'agrégat polycristallin est décrite, basée sur la mosaïque de Voronoï en vue d'obtenir des géométries 2D et 3D. Deux approches sont proposées selon que les frontières du volume élementaire représentatif suivent les bords des cellules de Voronoï ou non, et comparées à travers une série de calculs d'homogénéisation.

Mots clés — Polycristal, Micromécanique, Volume élémentaire représentatif, Périodicité.

1 Introduction

Dans les réacteurs nucléaires à eau sous-pression, le combustible est constitué de pastilles d'oxyde d'uranium (UO_2) empilées dans des tubes métalliques. La simulation du comportement des crayons combustible ainsi constitués nécessite d'avoir recours à une modélisation multi-échelle et multiphysique, les phénomènes modélisés étant regroupés en deux catégories : la thermo-mécanique et la physico-chimie relative au comportement des produits de fission gazeux.

L'étude d'un modèle complet d'agrégat polycristallin [4] permet d'appréhender plus finement le comportement d'un matériau en prenant en compte plus explicitement l'effet de la microstructure sur la réponse macroscopique observée expérimentalement. Dans le cas de l'UO_2, l'objectif est non seulement d'affiner le couplage entre la mécanique et les modèles de diffusion à l'échelle du grain mais d'identifier avec plus de précision les différents mécanismes de déformation à l'oeuvre selon le régime de sollicitations, tels que l'on peut les retrouver dans les cartes établies par Ashby et Frost [3].

L'objet de ce travail est de présenter la mise en place d'un modèle E.F. de polycristal d'UO_2 destiné à décrire le comportement viscoplastique du combustible à haute température couplé avec les phénomènes de diffusion des produits de fission gazeux. On s'intéresse ici plus précisément à la prise en compte des conditions aux limites périodiques sur des VER 2D et 3D.

La première partie présente brièvement la méthode retenue pour la génération de cette géométrie périodique et décrit deux approches différentes pour gérer la périodicité des conditions aux limites.

Ces deux approches sont mises en concurrence sur un calcul d'élasticité 2D dans la deuxième partie, où sont débattus les avantages et inconvénients de l'une et l'autre de ces approches.

Enfin, la troisième partie traite d'un calcul similaire mené sur un agrégat 3D. Les différentes difficultés induites par le maillage du VER ainsi que pour l'écriture des conditions aux limites sont présentées en détail. Un calcul applicatif est effectué sur le polycristal 3D auquel on associe un modèle de plasticité du grain plus représentatif du comportement réel du matériau.

2 Géométrie du VER

La mosaïque de Voronoï est généralement considérée comme une approximation convenable de la géométrie d'un polycristal ([4], [9]). On rappelle les principales étapes de la génération de la mosaïque : pour un tirage de N points M_i, $i \in \{1 \dots N\}$ selon une règle aléatoire donnée, l'espace géométrique des points p est découpé en N domaines définis par la relation :

$$C_i = \{\ p\ /\ ||p - M_i|| < ||p - M_j||\ \forall j \neq i\ \} \tag{1}$$

M_i est donc le centre du polyèdre convexe C_i (voir [9]). Chaque cellule de Voronoï (ie. chaque grain) est définie par l'intersection des médiatrices des segments entre le centre de la cellule et le centre de ses plus proches voisines.

Les calculs effectués sur le VER ont pour finalité de déterminer le comportement macroscopique effectif du matériaux. Dans ce cadre, les milieux périodiques offrent des propriétés intéressantes vis-à-vis des techniques d'homogénéïsation permettant le changement d'échelle entre le VER et la structure. Travailler sur une géométrie périodique permet de mettre de côté les effets de bords indésirables générés par le VER qui parasitent la réponse obtenue. Afin d'obtenir une mosaïque de Voronoï périodique, il faut s'assurer de la périodicité des germes centres de chaque cellule ([8]). Il est donc nécessaire de translater le tirage initial de germes dans toutes les directions adjacentes (horizontales, verticales, diagonales) pour obtenir un ensemble géométrique dont la partie centrale vérifie les conditions de périodicité (voir figure 1).

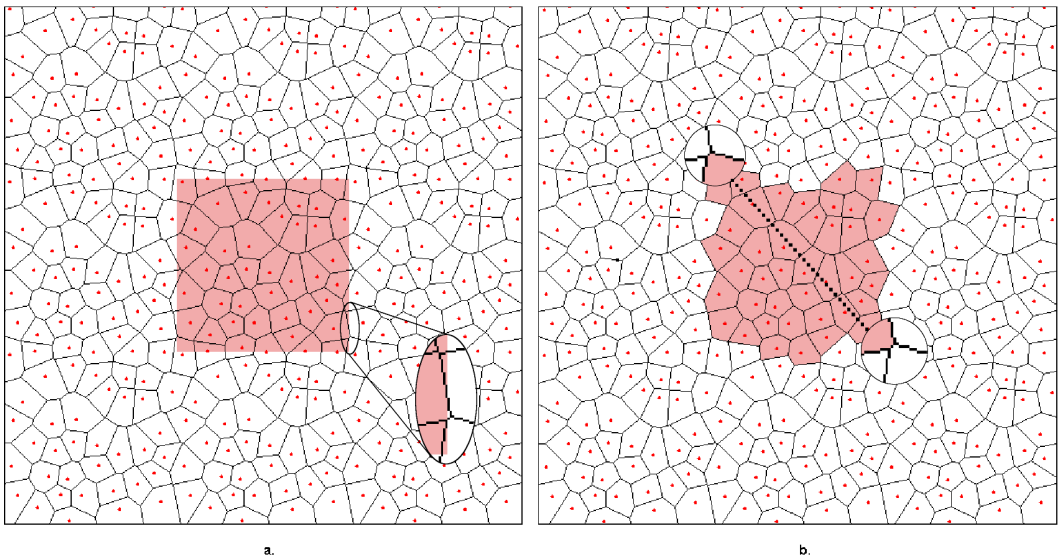

Figure 1 – Mosaïque de voronoï périodique 2D
a. VER régulier : La zone agrandie correspond aux probables difficultés de maillage
b. VER irrégulier : La zone agrandie correspond à l'irrégularité

Il est possible d'extraire de ce pavage un motif périodique qui caractérise la géométrie du VER polycristallin. Le motif retenu peut être la partie centrale du découpage de la mosaïque de Voronoï par une grille régulière en sous-domaines dont les dimensions horizontales et verticales sont les normes des vecteurs de périodicité utilisés pour les translations du tirage de germes initial. La géométrie obtenue, dite "régulière", est caractérisée par ses frontières rectilignes qui "tronquent" les grains situés en périphérie (voir figure 1 - a.).

Mais il est aussi possible de retenir comme période l'ensemble des cellules de Voronoï associées aux germes du tirage initial. Cette géométrie est dite "irrégulière" : ses bords ne sont plus rectilignes mais respectent les frontières des grains. (voir figure 1 - b.).

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

S'il semble naturel de retenir le VER à bords rectilignes, il convient de souligner ici les difficultés induites par cette géométrie dans le cadre d'un calcul éléments finis. En particulier, la manière dont les grains sont "coupés" aux frontières du volume (voir figure 1) peut générer d'importantes difficultés de maillage, puisque la taille des objets à traiter perd de fait son uniformité : les grains aux limites du VER se trouvent "dispersés" en fragments qui constituent des objets de taille aléatoire qu'il convient de mailler avec précaution. Outre le fait de perdre l'unicité grain / objet de maillage volumique, cette difficulté, toute relative dans le cas bidimensionnel, devient ardue en 3D.

A l'inverse, une géométrie "irrégulière" permet de traiter des objets (les grains) tous de taille homogène selon le tirage initial. On peut par ailleurs avancer la cohérence de cette approche avec les modèles grains définis pour la diffusion physico-chimique. Bien entendu, la difficulté inhérente à cette optique est le choix des conditions aux limites à considérer pour le calcul proprement dit.

Pour illustrer les particularités de ces deux approches, on réalise une série de calculs d'homogénéisation élastique sur un agrégat 2D à 40 grains.

3 Homogénéisation élastique

Les calculs présentés dans cette partie sont effectués sur une mosaïque de Voronoï générée par un applet java. Les données géométriques constitutives de cette mosaïques sont récupérées pour reconstituer et mailler le polycristal dans le code E.F. CAST3M développé par le CEA, avec lequel seront effectués les calculs.

3.1 présentation des modèles retenus

Le VER retenu est un motif périodique de 40 grains maillés par des triangles à 3 noeuds. A cette géométrie est associée un modèle de comportement élastique linéaire isotrope dont les coefficients sont tirés aléatoirement pour chaque grain. Le tirage est choisi aléatoire uniforme tant pour le module d'Young (voir figure 2) que pour le coefficient de Poisson(voir le tableau 2 pour les valeurs moyennes $\overline{\mathrm{E}}$, $\overline{\nu}$ et les écarts-types $< \mathrm{E} >$, $< \nu >$ retenus). On génère de la sorte deux modèles équivalents à bords rectilignes (modèle a.) ou non (modèle b.).

3.2 Caractérisation des essais numériques

Les deux VER considérés étant périodiques, pour chaque noeud $\mathbf{x}(x_1,\ x_2,\ x_3)$ le déplacement peut se mettre sous la forme : $\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{E}.\mathbf{x} + \mathbf{u}^{\#}(\mathbf{x})$ où E est la déformation moyenne du VER et $u^{\#}$ le déplacement périodique. Si $\mathbf{x^m}$ et $\mathbf{x^n}$ sont deux noeuds en vis à vis sur les frontières du maillage,

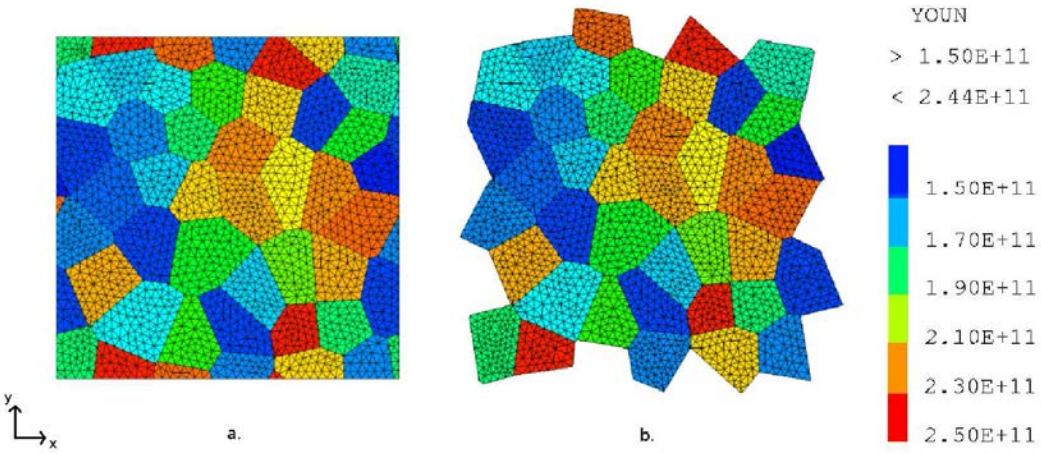

Figure 2 – Répartition des modules d'Young pour le modèle de polycristal élastique

les conditions de périodicité pour ces deux noeuds peuvent alors s'écrire (voir [6]) :

$$\mathbf{E}.\mathbf{x^m} - \mathbf{u}(\mathbf{x^m}) = \mathbf{E}.\mathbf{x^n} - \mathbf{u}(\mathbf{x^n}) \tag{2}$$

Ce qui nous permet d'écrire le déplacement macroscopique $\Delta\mathbf{U}$ associé à la déformation moyenne $\mathbf{E}$ imposée :

$$\Delta\mathbf{U} = \mathbf{u}(\mathbf{x^m}) - \mathbf{u}(\mathbf{x^n}) = \mathbf{E}.(\mathbf{x^m} - \mathbf{x^n}) \tag{3}$$

Cette relation exprime la condition de périodicité comme équation linéaire entre degrés de liberté, que les codes de calculs peuvent traiter classiquement. Plusieurs calculs sont effectués sur les modèles a. et b. dans le but de déterminer les coefficients de la matrice d'élasticité associée à chacun des deux modèlespour lesquels on impose à chaque fois la déformation moyenne du VER (voir tableau 1 ci-dessous) :

$$\mathbf{E_1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{E_2} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{E_3} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Tableau 1 – Tenseur de déformations macroscopiques des différents essais

Dans le cas du modèle b., il convient de bien préciser vecteurs de périodicité. La méthode de construction du VER impose de tenir compte d'une troisième direction de périodicité "coin" (voir fig. 1) en plus des 2 directions usuelles horizontale et verticale. Pour une meilleure illustration du problème, le maillage (voir figure 3) a été généré comme une mosaïque de Voronoï périodique à 4 grains.

On retrouve pour ce maillage les périodicités classiques repérées par les translations du VER dans les directions horizontale et verticale. Toutefois une partie du contour (identifiée sur la figure par l'indice (1 1)) ne peut-être retrouvée par périodicité qu'en translatant le maillage dans la direction diagonale. Pour chaque couple de noeuds aossicié par cette relation de périodicité l'équation 3 doit être vérifiée. En particulier, on remarque immédiatement que quel que soit le tenseur de déformation macroscopique $\mathbf{E}$ considéré, le déplacement relatif $\Delta\mathbf{U}$ observé pour ces noeuds sera non nul. Ces périodicités "coins", qui de fait son limitées à un unique point dans le cas d'un VER

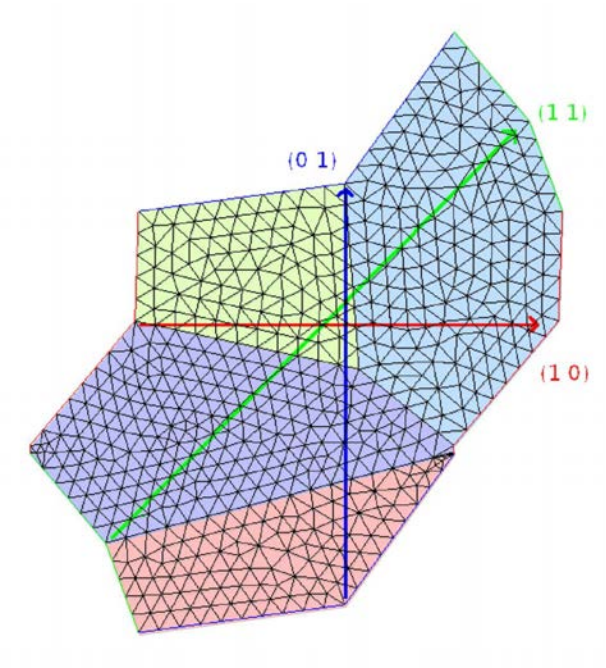

Figure 3 – Agrégat périodique irrégulier à 4 grains

régulier, deviennent ici potentiellement des arêtes qu'il faut traiter de manière spécifique.

3.3 Résultats

Les matrices d'élasticité globales obtenues par intégration des forces de réactions nodales aux bords pour chacun des deux modèles. La symétrie des réactions nodales aux frontières en vis-à-vis du VER est bien vérifiée, et les deux modèles sont validés sur un calcul test sur un VER de référence dont les propriétés ont été choisies uniformes dans les différents grains.

Pour éviter le biais induit par la discrétisation en éléments finis, le maillage de la géométrie irrégulière est obtenu par translations successives de fragments de grains à partir du maillage de la géométrie régulière. Dans ce cas les matrices d'élasticité globales obtenues sont égales à la précision machine près.

$$\mathbf{C_a} = \begin{pmatrix} 2.6079e11 & 1.1498e11 & 2.5500e08 \\ 1.1498e11 & 2.6182e11 & 3.0217e07 \\ 2.5500e08 & 3.0217e07 & 7.3046e10 \end{pmatrix}$$

$\bar{E}$ (MPa)	<E> (MPa)	$\bar{\nu}$	$< \nu >$
2.e5	5.e4	0.3	5.e-2

Tableau 2 – Matrice d'élasticité et distribution des paramètres matériaux

4 Application au polycristal 3D

4.1 Génération du VER

Le modèle E.F. de polycristal 3D est généré avec la méthode décrite précédemment pour le cas 2D. On retient la géométrie "irrégulière" qui présente l'avantage de conserver l'intégrité des grains, ce qui allège considérablement les difficultés liées au maillage. Il convient toutefois de

prendre en compte de nouvelles directions de périodicité liées à la génération de la mosaïque de Voronoï 3D périodique : le motif initial des germes doit être translaté 26 fois (pour 26 “cubes” voisins du VER) pour observer la périodicité. Potentiellement, ce sont donc 13 directions de périodicité qu’il nous faut prendre en compte :

- 3 périodicité “faces” usuelles ;
- 6 périodicités “arêtes” ;
- 4 périodicités “coins”.

Ceci est illustré sur un VER générique (voir figure 4) qui possède les différents types de périodicités : face (en rouge sur la figure), arête (en jaune) et coin (en vert). Une fois repérées les directions de périodicité, l’écriture des conditions aux limites associées au VER est identique à celle présentée dans le cas 2D (voir équation 3).

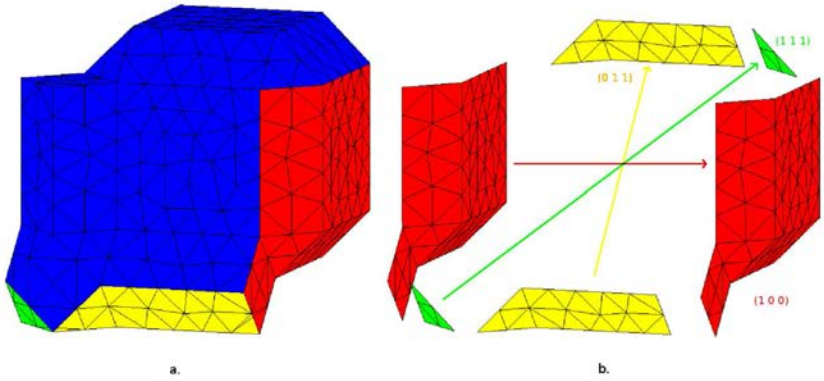

Figure 4 – Génération 3D a. VER générique b. Mise en évidence des différents types de périodicité

4.2 Maillage du polycristal 3D

Le modèle de polycristal étudié dans cette partie est obtenu à partir d’une mosaïque de voronoï 3D périodique à 30 grains maillée avec des tétraèdres à 10 noeuds (voir figure 5). Une fois générée la mosaïque de Voronoï associée au polycristal, il reste à discrétiser cette géométrie en E.F., ce qui dans le cas 3D ne va pas sans difficultés.

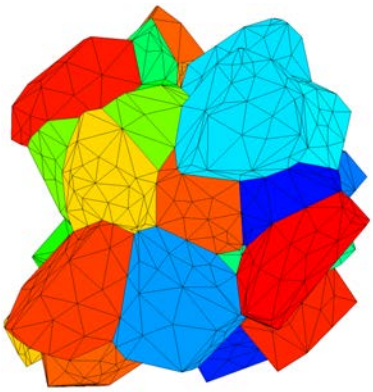

Figure 5 – Mosaïque de Voronoï 3D périodique

Un premier problème est posé par la définition proprement dite de la géométrie du VER. La mosaïque de Voronoï périodique est générée avec QHull (voir [5]), un programme en licence libre externe au code de calcul, mais ne tient pas compte des difficultés liées à l'utilisation de la méthode des éléments finis. En particulier, la géométrie obtenue n'est pas suffisamment régulière pour être maillée correctement : les tailles relatives de certaines arêtes sont trop différentes pour obtenir une discrétisation exploitable.

A ce stade, deux options sont possibles : modifier le tirage des germes de grains en amont de façon à obtenir une géométrie qui possède d'emblée des propriétés convenables pour le maillage ou procéder à une régularisation de la géométrie a posteriori en "tronquant" les arêtes trop courtes (voir 6) avant de procéder au maillage du modèle. Dans ce cas la mosaïque de Voronoï initiale se trouve altérée et ne répond plus à la définition (1). Dans nos travaux c'est cette deuxième option qui a été retenue pour une première étape.

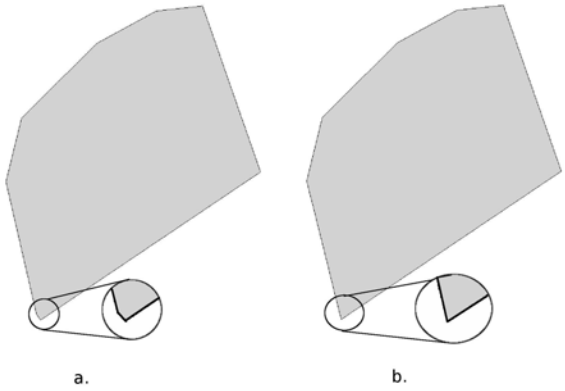

Figure 6 – Traitement d'une face de grain irrégulière a. Avant régularisation b. Après régularisation

A noter que ce choix implique de s'assurer de la préservation de la périodicité de l'agrégat, puisque ses différentes frontières peuvent être modifiées par l'opération de régularisation de la mosaïque de Voronoï de départ. Il convient d'effectuer la régularisation de façon ordonnée de manière à modifier chaque frontière de la même manière que son vis-à-vis. La méthode employée est détaillée ci-dessous (voir figure 7) et permet de traiter les différents types de périodicité dans l'ordre adéquat pour conserver la périodicité globale du modèle.

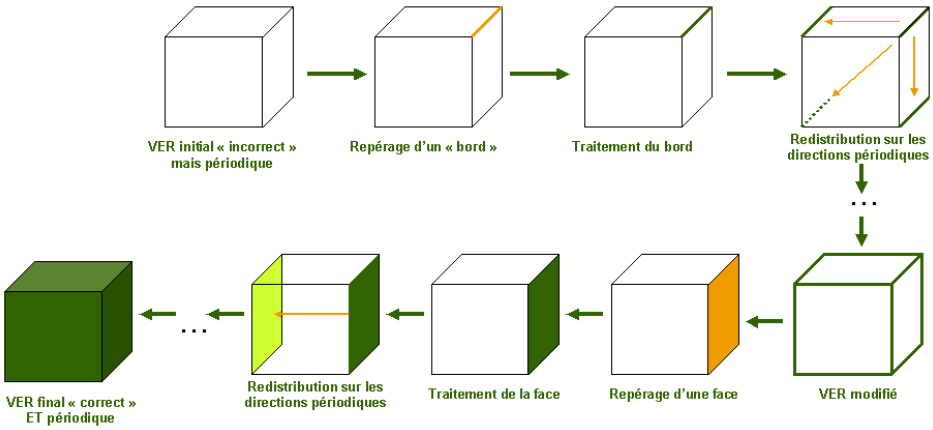

Figure 7 – Régularisation du maillage : méthode de conservation de la périodicité

Il faut maintenant s'assurer que le modèle E.F. obtenu est périodique non seulement du point de vue strictement géométrique mais aussi du point de vue du maillage, à savoir que les surfaces en vis-à-vis sont maillées de la même façon. Cette propriété était immédiate en 2D, à la simple condition de mailler toutes les arêtes du contour avec la même précision. Dans le cas tridimensionnel, il convient d'identifier précisément les faces liées par des relations de périodicité afin de les mailler exactement de la même manière (voir figure 8). C'est seulement de cette façon que les relations de périodicité, écrites sur chaque couple de noeuds du maillage en vis-à-vis, seront correctement posées.

Le VER finalement obtenu, maillé avec des éléments quadratiques compte 8823 noeuds. cette relative légèreté du maillage est permise par le choix du contour "irrégulier", pour lesquels tous les objets volumiques à mailler sont de taille équivalente. A noter toutefois que le nombre de noeuds augmente très rapidement avec le nombre de grains retenus pour le volume élémentaire représentatif, chaque grain ayant lui-même plus de voisins en moyenne et par conséquent plus de facettes à mailler.

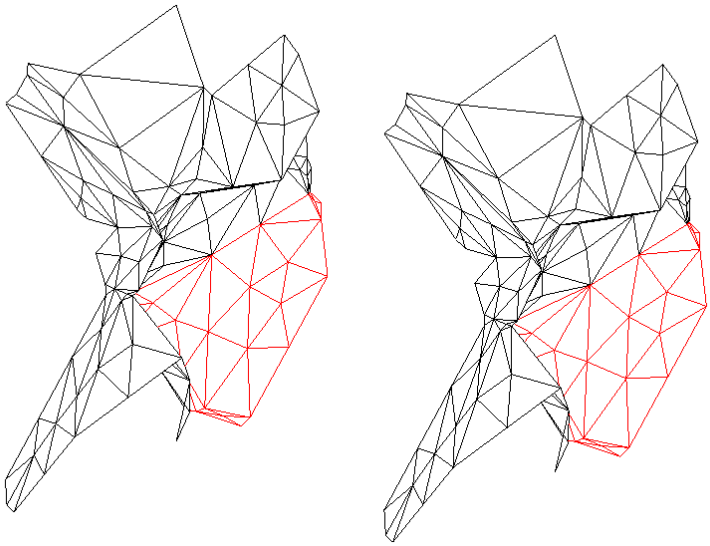

Figure 8 – Mise en évidence de la périodicité du maillage

4.3 Homogénéisation élastique

De la même manière que dans le cas 2D, on effectue une série de calculs d'homogénéisation élastique sur le VER périodique de 30 grains choisi comme référence. Plusieurs essais sont effectués afin de déterminer la matrice d'élasticité équivalente du VER en imposant à chaque fois le déplacement moyen sur le bord du VER.

Comme dans la partie précédente, on associe au polycristal un modèle de comportement élastique linéaire isotrope dont les coefficients sont tirés aléatoirement pour chaque grain selon une loi uniforme dont les paramètres sont donnés dans le tableau 2.

Six essais sont réalisés pour déterminer les coefficients de la matrice d'élasticité du polycristal, lesquels sont calculés de la même manière que dans le cas 2D. Le calcul est dans un premier temps validé sur un polycristal homogène dont les paramètres matériaux sont pris égaux dans les

différents grains (voir tableau 3) puis un deuxième calcul est effectué sur le polycristal inhomogène (voir tableau 4).

Coefficient	Valeur théorique	$\frac{\lvert C_{th}-C_{EF}\rvert}{C_{th}}$
C_{11}	$\frac{E(1-\nu)}{(1+\nu)(1-2\nu)} = 2,69231e+11$	1.24686e-15
C_{12}	$\frac{\nu E}{(1+\nu)(1-2\nu)} = 1,15385e11$	2.77710e-15
C_{44}	$\frac{E}{2(1+\nu)} = 7,69231e+10$	0.000

Tableau 3 – Résultats pour le polycristal homogène

Les valeurs obtenues pour le calcul de validation sont cohérentes avec celles attendues (voir tableau 3) : les coefficients C_{EF} déterminés par simulation sont égaux aux coefficients théoriques C_{th} à la précision machine près. La symétrie des forces de réactions aux frontières du polycristal observée sur les simulations semble valider les choix de conditions aux limites effectués pour cette géométrie “irrégulière”.

Les premiers résultats sur le polycristal inhomogène permettent de faire quelques observations sur la réprésentativité du polycristal retenu. En particulier, on cherche à retrouver l’isotropie macroscopique du matériau dans le comportement équivalent établi par les simulations sur le VER. Gazis et coll. (voir [7]) ont développé une méthode en vue de quantifier le caractère isotrope d’un tenseur d’élasticité en le projetant sur une base de tenseur isotropes issus de la décomposition classique partie sphérique / partie déviatorique :

$$\Pi C = KB_1 + GB_2 \tag{4}$$

Où K et G sont le module de compressibilité et de cisaillement respectivement et $\mathbf{B_1}$ et $\mathbf{B_2}$ définis comme suit :

$$\mathbf{B_1} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \mathbf{B_2} = \begin{pmatrix} \frac{4}{3} & -\frac{2}{3} & -\frac{2}{3} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{2}{3} & \frac{4}{3} & -\frac{2}{3} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{2}{3} & -\frac{2}{3} & \frac{4}{3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

L’écart au sens de la norme entre le tenseur $\mathbf{C}$ et son projeté ΠC permet d’évaluer son caractère anisotrope. Si l’on décompose $\mathbf{C}$ sous la forme de 4 sous-matrices de type :

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} C_1 & C_2 \\ C_2 & C_3 \end{pmatrix} \text{ alors :}$$

$$\text{La norme } ||C|| = \mathrm{Tr}\left(C_1.C_1 + 2C_2.C_2^T + 2C_2^T.C_2 + 4C_3.C_3\right) \tag{5}$$

$$\text{et l'erreur } R(C) = \frac{||\Pi C - C||}{||C||} \tag{6}$$

Plus ce rapport est proche de 0 et plus le VER est proche de l’isotropie représentative du comportement macroscopique du matériau. Lorsque le rapport R($\mathbf{C}$) tend vers 1, l’approximation isotrope est en revanche très mauvaise.

	$\|\|C\|\|$	$\|\|\Pi C\|\|$	$\frac{\|\|\Pi C - C\|\|}{\|\|C\|\|}$
Polycristal homogène	6.06913e11	6.06913e11	1.49012e-08
Polycristal inhomogène	6.03522e11	6.03522e11	9.88714e-04

Tableau 4 – Isotropie du tenseur d'élasticité macroscopique

Les résultats obtenus pour un comportement élastique sur le polycristal 3D semblent montrer que 30 grains sont suffisants pour obtenir un comportement macroscopique quasi-isotrope. Bien sûr, cette conclusion n'est valable que dans le cas d'un modèle élastique et avec la dispersion des paramètres matériaux retenue pour nos calculs.

4.4 Plasticité cristalline

L'étude du combustible à l'échelle du polycristal permet de prendre en compte un certain nombre de phénomènes liés à la microstructure du matériau, dont l'incompatibilité de déformation due aux orientations aléatoires des grains. Les mesures expérimentales (par exemple [1]) mettent en effet en évidence l'anisotropie du comportement plastique du grain : le monocrystal se déforme préférentiellement dans certaines orientations cristallographiques qui correspondent aux plans de glissement des dislocations.

Le modèle retenu ici, largement basé sur des travaux antérieurs (voir notamment [10]) est un modèle de plasticité cristalline classique qui prend en compte les deux familles principales de systèmes de glissement de l'UO_2 ((1 0 0) $<$ 1 1 0 $>$ et (1 1 0) $<$ 1 1 0 $>$ respectivement). Les densités de dislocations pour chaque système de glissement sont prises comme variables internes du modèle, dont l'évolution est gérée par une équation cinétique classique résultant de la compétition entre stockage et restauration dynamique des dislocations.

La simulation effectuée est réalisée sur un agrégat 30 grains dont les orientations cristallines sont repérées par les trois angles d'Euler θ, ϕ et ψ sont tirés aléatoirement avec une distribution aléatoire uniforme. La déformation macroscopique appliquée au VER est imposée sous la forme suivante (avec $E_{zz} = E_{zz}(t)$ fonction linéaire du temps, nulle à l'origine) :

$$\mathbf{E_{3D}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_{zz} \end{pmatrix}$$

L'état de contrainte final du polycristal est quasi-hydrostatique, et les contraintes normales calculées aux joints de grains sont de fait uniformes dans le VER. Les valeurs moyennes $\overline{\sigma}_n$ et les écart-types $< \sigma_n >$ observés sur ces contraintes en différents instants du calcul sont présentées dans le tableau 5.

Instant (s)	σ_n (Pa)	$< \sigma_n >$ (Pa)
30	-2,08e08	8,57e06
100	-5,34e8	1,55e7
1000	-4,72e9	1,36e7

Tableau 5 – Contrainte aux joints de grains

Par ailleurs le seuil de plasticité, qui est ici directement corrélé aux cissions critiques initiales des différents systèmes de glissement de dislocations, est atteint pour les différents grains à des instants différents selon l'orientation cristalline propre à chaque grain, comme le montre la figure 9.

En effet la contrainte “perçue” par un système de glissement, qui pilote l’activation du glissement et de la cinétique de multiplication de dislocations, est directement dépendante de l’orientation de chaque grain.

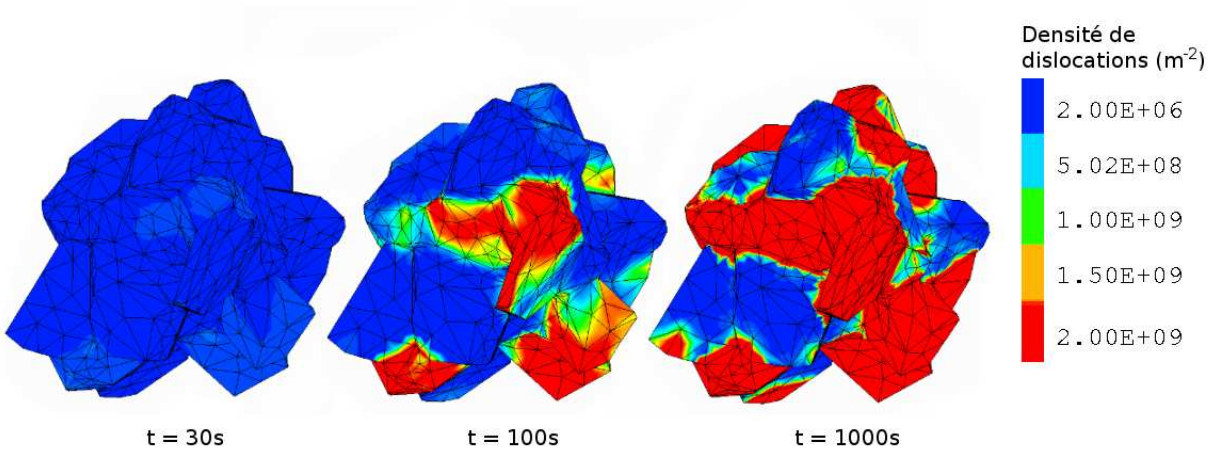

Figure 9 – Evolution de la densité de dislocation du système (1 0 0) <0 1 0> au cours du temps

5 Conclusions et perspectives

Deux géométries concurrentes ont été présentées pour la modélisation E.F. d’un VER polycristallin : l’une, dite “régulière”, choisie comme un motif classique de frontières rectiligne ; l’autre, dite “irrégulière” respectant les frontières des grains. Les calculs d’homogénéisation élastique réalisés sur des configurations 2D puis 3D valident l’écriture des conditions aux limites de périodicité pour le VER irrégulier, qui présente l’avantage d’être beaucoup plus léger en terme de maillage.

Par la suite il sera possible de proposer un modèle de comportement plus réaliste des grains prenant en compte les différents mécanismes de déformation observés pour le combustible, dont la montée de dislocation, la diffusion ou le glissement aux joints de grains.

La prise en compte de conditions aux limites en contraintes (par exemple contrainte nulle sur les bords libres pour un essai de traction) est une autre des perspectives offertes par ce travail notamment en vue de la comparaison entre résultats de simulation et essais expérimentaux.

Références

[1] A. Alamo, J.M. Lefebvre, J. Soullard. “Déformation plastique du bioxyde d’uranium : observation des sous-structures de dislocations” . *Journal of Nuclear Materials* 75, 1978.

[2] H. Alexander, P. Haasen. “Dislocation and plastic flow in the diamond structure” . *Solid structures Physics* 22 :27, 1968.

[3] Ashby, Frost. *“Deformation-mechanisms maps”* Pergamon Press, London, 1982.

[4] F. Barbe, L. Decker, D. Jeulin, G. Cailletaud. “Intergranular and intragranular behavior of polucristalline aggregate -Part 1 : F.E. Model”. *International journal of plasticity*, 17, 2001.

[5] C.D. Barber, D.P. Dobkin, H.T. Huhdanpaa. “The Quickhull algorithm for convex hulls, ACM Trans” *Mathematical Software*, December 1996.

[6] S. Bourgeois, O. Débordes *Comportement mécanique des tissés, chapitre 4 : Homogénéisation périodique*, Hermes, 2006.

[7] D. C. Gazis, I. Tadjbakhsh, et Toupin R.A. “The elastic tensor of given symmetry nearest to an anisotropic elastic tensor.” *Acta Cryst.*, 16,917-922, 1963.

[8] M. Nygards, P. Gudmundson. “Three-dimensional periodic Voronoi grain models and micromechanical FE-simulations of a two-phase steel”. *Computational Materials Science*, 24, 2002.

[9] T. Kanit, S. Forest, I. Galliet, V. Monoury, d. Jeulin. “Determination of the size of the representative volume element for random composites : statistical and numerical approach”. *International Journal of Solides and Structures*, 40, 3647-3679, 2003.

[10] F. Sauter. “*Comportement viscoplastique du dioxyde d’uranium a haute temperature”*. These, Institut National Polytechnique de Lorraine, 2001.